



GENERALIZAÇÕES DO FENÔMENO DE ALARGAMENTO DOPPLER

Guilherme Guedes de Almeida

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Nuclear.

Orientadores: Alessandro da Cruz Gonçalves
Daniel Artur Pinheiro Palma

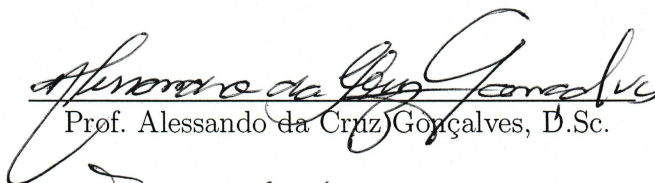
Rio de Janeiro
Julho de 2019

GENERALIZAÇÕES DO FENÔMENO DE ALARGAMENTO DOPPLER

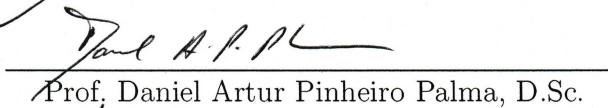
Guilherme Guedes de Almeida

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

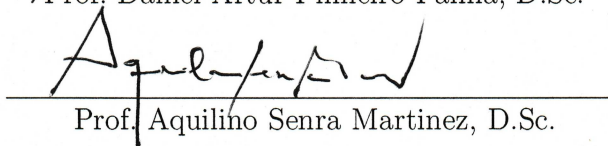
Examinada por:



Prof. Alessandro da Cruz Gonçalves, D.Sc.



Prof. Daniel Artur Pinheiro Palma, D.Sc.



Prof. Aquilino Senra Martinez, D.Sc.



Prof. Zelmo Rodrigues de Lima, D.Sc.



Prof. Amir Zacarias Mesquita, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

JULHO DE 2019

Almeida, Guilherme Guedes de
 Generalizações do Fenômeno de Alargamento
 Doppler/Guilherme Guedes de Almeida. – Rio de
 Janeiro: UFRJ/COPPE, 2019.
 XV, 133 p.: il.; 29, 7cm.
 Orientadores: Alessandro da Cruz Gonçalves
 Daniel Artur Pinheiro Palma
 Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de
 Engenharia Nuclear, 2019.
 Referências Bibliográficas: p. 116 – 122.
 1. Fenômeno de Alargamento Doppler. 2. Funções
 de Voigt. 3. Aproximações de Bethe e Placzek. 4.
 Distribuições Quase-Maxwellianas. 5. Distribuição de
 Tsallis. 6. Distribuição de Kaniadakis. I. Gonçalves,
 Alessandro da Cruz *et al.* II. Universidade Federal do Rio
 de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III.
 Título.

*“A sabedoria é um paradoxo.
O homem que mais sabe é
aquele que mais reconhece a
vastidão da sua ignorância.”*

Friedrich Nietzsche

Agradecimentos

A defesa de uma tese de doutorado é apenas a coroação de um trabalho árduo que consome anos de dedicação, passando naturalmente por momentos bons, e outros nem tanto. O apoio na área acadêmica, fornecido pelos orientadores e colegas de doutoramento é de suma importância, mas eventualmente surgem momentos de fraqueza, onde contamos com o apoio de amigos e familiares para nos dar força e incentivo a prosseguir nesta jornada. Assim, não é uma vitória que se alcança sozinho, mas sim com o apoio de muitas pessoas, dentre as quais algumas merecem ser explicitamente lembradas.

Inicialmente, gostaria de agradecer aos meus orientadores, em especial ao Daniel Palma, por inúmeras discussões tanto presenciais como virtuais por *Skype* e *WhatsApp*, sem as quais a conclusão deste trabalho teria sido tarefa muito mais árdua, ou até mesmo impossível!

Ao amigo de longa data Alexandre Antunes pela inestimável ajuda com a linguagem C, com a qual minhas habilidades neste campo evoluíram sobremaneira.

Ao amigo e ex-colega de trabalho no CEFET Vitor Balestro, atualmente professor do Instituto de Matemática e Estatística da Universidade Federal Fluminense, por sempre estar disponível para discussões matemáticas, que muito contribuíram para a qualidade final do texto, e também por me proporcionar a oportunidade de futuramente diminuir meu número de Erdős.

Aos membros da banca de defesa, os professores Aquilino Senra Martinez, Zelmo Rodrigues de Lima e Amir Zacarias Mesquita pela leitura minuciosa do texto desta tese, e por diversos comentários e críticas que contribuíram muito, não somente para a qualidade do texto final, como também para possíveis continuações deste trabalho.

Ao amigo e colega de trabalho Roberto Zarco, por inúmeras revisões ortográficas tanto em nossa língua materna quanto na língua inglesa, e por sempre proferir palavras de incentivo.

Ao Thiago Belo, que juntamente comigo compõe a totalidade da turma de Física de Reatores do período 2015.1, por toda a parceria.

Aos companheiros de sala durante esses anos, Edson Enrice, Thiago Juncal e Willian Abreu, por terem me proporcionado um excelente ambiente de trabalho.

Aos funcionários da secretaria, Lili, Jô e Washington, por estarem sempre dis-

poníveis para ajudar.

Ao amigo André Valente, que iniciou juntamente comigo o projeto de obter o título de doutor, por todo o incentivo e por inúmeras viagens para a UFRJ embalados pelas mensagens positivas do Clóvis Monteiro na Super Rádio Tupi.

Aos amigos Diegão e Tatiana, pelas inúmeras caronas para a UFRJ, assim como por terem comparecido no dia da defesa para fazer o registro fotográfico.

Aos amigos e colegas de trabalho Bruno Policarpo, Edvar Batista e Jefferson Moraes (caboclo Espartano), por tornarem mais suave o trabalho administrativo nos tempos em que, de forma concomitante com o doutoramento, fui coordenador de curso no CEFET.

Aos colegas de trabalho Bruno Lago, Gustavo Guttman, Washington Raposo e Leonardo Grigorio, que se tornaram grandes amigos.

À diretora de ensino Gisele Vieira e ao diretor geral Carlos Henrique, ambos do CEFET-RJ, pela celeridade quanto ao meu pedido de afastamento para capacitação.

Agradeço de forma mais que especial a minha esposa Cida, por todo amor, companheirismo, parceria e compreensão, e por sempre me dar todo o apoio necessário, tornando mais suave todo o stress advindo de situações adversas durante toda esta caminhada.

Também agradeço de forma especial ao meu filho Guilherme, que apesar de sua pouca idade teve maturidade o suficiente para entender a minha maior ausência nos momentos mais críticos, sempre me apoiando e me incentivando a progredir.

Ao meu outro filho, o pequeno Vicente, que mesmo ainda em ambiente intrauterino, já enche meus dias de felicidade, e me traz mais uma motivação para viver.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

GENERALIZAÇÕES DO FENÔMENO DE ALARGAMENTO DOPPLER

Guilherme Guedes de Almeida

Julho/2019

Orientadores: Alessandro da Cruz Gonçalves

Daniel Artur Pinheiro Palma

Programa: Engenharia Nuclear

O movimento de agitação térmica de núclídeos no núcleo de reatores é adequadamente representado na seção de choque microscópica da interação nêutron núcleo através da Função de Alargamento Doppler $\Psi(x, \xi)$, assim como da Função do Termo de Interferência $X(x, \xi)$, cujas formas funcionais são oriundas da Mecânica Quântica, através da formulação de um nível de Briet-Wigner, e da Mecânica Estatística, com a distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann. Os resultados assim obtidos, apresentam em suas formas funcionais integrais sem solução analítica e com estrutura complicada, fazendo com que o uso de algumas aproximações torne-se útil. Assim, considera-se as aproximações de Bethe e Placzek para se obter expressões aproximadas para as funções originais $\Psi(x, \xi) \approx \psi(x, \xi)$ e $X(x, \xi) \approx \chi(x, \xi)$. O primeiro tipo de generalização proposto nesta tese, consiste em não se considerar as aproximações de Bethe e Placzek. Neste contexto estuda-se, individualmente, o efeito de cada uma destas aproximações, assim como de suas combinações em pares. Deste modo, pode-se identificar as aproximações mais relevantes, além de relacioná-las com os conceitos físicos que as justifiquem. A segunda proposta de generalização consiste em estudar as consequências de se considerar uma distribuição estatística de velocidades deformada no lugar da distribuição de Maxwell-Boltzmann. Consideram-se, então, duas distribuições estatísticas quase-maxwellianas: a de Tsallis, dependente de um parâmetro q , e a de Kaniadakis, dependente de um parâmetro κ . Sendo assim, mantendo-se a forma de entender a Mecânica Quântica do assunto inalterada, são consideradas deformações no comportamento gaussiano da distribuição de Maxwell-Boltzmann. Com a pesquisa realizada pretende-se estender o entendimento do Fenômeno de Alargamento Doppler importando conceitos de outras áreas do conhecimento.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

GENERALIZATIONS OF THE DOPPLER BROADENING PHENOMENA

Guilherme Guedes de Almeida

July/2019

Advisors: Alessandro da Cruz Gonçalves

Daniel Artur Pinheiro Palma

Department: Nuclear Engineering

The thermal nuclei motion in the reactor core is properly represented in the microscopic cross section of the neutron-nucleus interaction through the Doppler Broadening Function $\Psi(x, \xi)$, as well as in the Interference Term Function $X(x, \xi)$, whose functional forms are derived from Quantum Mechanics, through the single level Briet-Wigner formalism, and from Statistical Mechanics, with the Maxwell-Boltzmann velocity distribution. The results thus obtained present in their functional forms, integrals without analytical solution and with complicated structure, making the use of some approximations useful. Then, we consider the Bethe and Placzek approximations to obtain approximate expressions for the original functions $\Psi(x, \xi) \approx \psi(x, \xi)$ and $X(x, \xi) \approx \chi(x, \xi)$. The first type of generalization proposed in this thesis consists in not considering the Bethe and Placzek approximations. In this context, the effect of each one of these approximations, as well as their combinations in pairs, are studied individually. In this way, one can identify the most relevant approximations, as well as relate them to the physical concepts that justify them. The second proposal of generalization is to study the consequences of considering a deformed statistical velocity distribution in place of the Maxwell-Boltzmann distribution. It is considered, then, two quasi-Maxwellian statistical distributions, namely the Tsallis statistics, dependent on a parameter q , and that for Kaniadakis, dependent on a parameter κ . Thus, keeping the way of understanding the Quantum Mechanics of the subject unchanged, two deformations in the gaussian behavior of the Maxwell-Boltzmann distribution are considered. The research carried out intends to extend the understanding of the Doppler Broadening Phenomenon by importing concepts from other areas of knowledge.

Sumário

Lista de Figuras	xi
Lista de Tabelas	xiv
Introdução	1
1 Distribuições Estatísticas Quase-Maxwellianas	11
1.1 A entropia de Boltzmann-Gibbs	12
1.2 A distribuição de Maxwell-Boltzmann	15
1.3 A entropia de Tsallis	21
1.4 A distribuição de Tsallis	24
1.4.1 Expressões matemáticas e propriedades	24
1.4.2 Limites das expressões para $q \rightarrow 1$	28
1.5 A distribuição de Kaniadakis	30
1.5.1 Expressões matemáticas e propriedades	31
1.5.2 Limites das expressões para $\kappa \rightarrow 0$	35
2 O Fenômeno de Alargamento Doppler	38
2.1 Expressão geral da Função de Alargamento Doppler	39
2.2 Expressão geral da Função do Termo de Interferência	45
2.3 As aproximações de Bethe e Placzek	46
2.4 Propriedades da Função de Alargamento Doppler e da Função do Termo de Interferência	48
3 Análise das aproximações de Bethe e Placzek	55
3.1 Funções de Alargamento Doppler generalizadas	56
3.2 Uma abordagem alternativa das aproximações de Bethe e Placzek . .	65
4 Fenômeno de Alargamento Doppler com Estatística de Tsallis	68
4.1 Funções de Voigt com estatística de Tsallis	69
4.2 Resultados	71

5	Fenômeno de Alargamento Doppler com Estatística de Kaniadakis	88
5.1	Expressão geral da Função de Alargamento Doppler e da Função do Termo de Interferência com estatística de Kaniadakis	89
5.2	Funções de Voigt com estatística de Kaniadakis	93
5.3	Resultados	94
	Conclusão	111
	Referências Bibliográficas	116
A	Estudo do sistema de duas partículas no referencial do centro de massa	123
B	O método da Quadratura de Gauss-Legendre	125
B.1	Quadratura de Gauss com 1 ponto	126
B.2	Quadratura de Gauss com 2 pontos	127
B.3	Quadratura de Gauss com 3 pontos	129
B.4	Os Polinômios de Legendre	130
B.5	Quadratura de Gauss-Legendre	131
B.6	Mudança de variáveis	133

Lista de Figuras

1	Uma das estruturas de urânio e grafite usadas no CP-1.	2
2	Primeiras lâmpadas acesas pela eletricidade gerada por um reator nuclear, em 20 de dezembro de 1951. <i>Experimental Breeder Reactor I</i> (EBR-I). Idaho, EUA.	3
3	APS-1 Obninsk (<i>Atomic Power Station 1 Obninsk</i>), primeira usina no mundo a fornecer energia elétrica para a rede.	4
4	Seção de choque do ^{238}U em função da energia do nêutron na região de ressonâncias	5
5	Esquema de obtenção e aplicação das Funções de Voigt no contexto da Física de Reatores.	8
1.1	James Clerck Maxwell (1831 - 1879) e Ludwig Boltzmann (1844 - 1906).	15
1.2	Distribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases nobres com temperatura $T = 300\text{ K}$	20
1.3	V_{mp} , $\langle V \rangle$ e V_{rms} para o ^{20}Ne com temperatura $T = 300\text{ K}$	20
1.4	Distribuição de Maxwell-Boltzmann para o ^{132}Xe para diversas temperaturas.	21
1.5	Constantino Tsallis (1943 -).	21
1.6	Distribuição de velocidades de Tsallis para o ^{132}Xe para $T = 900\text{ K}$ considerando alguns valores de q	28
1.7	Giorgio Kaniadakis (1957 -).	31
1.8	Distribuição de velocidades de Kaniadakis para o ^{132}Xe para $T = 900\text{ K}$ considerando alguns valores de κ	35
2.1	Região de integração começando pela variável v_r	41
2.2	Região de integração começando pela variável V	41
2.3	Comportamento da Função de Alargamento Doppler e da Função do Termo de Interferência variando ξ	54

3.1	Funções de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e $\psi_{23}(x, \xi)$ para a ressonância do ^{239}Pu com energia $E_0 = 0,296\text{eV}$ e para a ressonância do ^{238}U com energia $E_0 = 6,67\text{eV}$ com $T = 300\text{ K}$, $T = 800\text{ K}$ e $T = 1500\text{ K}$	62
3.2	Funções de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e $\psi_{23}(x, \xi)$ para a ressonância do ^{239}Pu com energia $E_0 = 0,296\text{eV}$ para $T = 300\text{ K}$, $T = 800\text{ K}$ e $T = 1500\text{ K}$	63
3.3	Funções de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e $\psi_{23}(x, \xi)$ para a ressonância do ^{238}U com energia $E_0 = 6,67\text{eV}$ para $T = 300\text{ K}$, $T = 800\text{ K}$ e $T = 1500\text{ K}$	63
4.1	Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Tsallis variando q para $\xi = 0,05$ (à esquerda) e $\xi = 0,10$ (à direita).	78
4.2	Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Tsallis variando q para $\xi = 0,15$ (à esquerda) e $\xi = 0,20$ (à direita).	78
4.3	Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Tsallis variando q para $\xi = 0,25$ (à esquerda) e $\xi = 0,30$ (à direita).	78
4.4	Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Tsallis variando q para $\xi = 0,35$ (à esquerda) e $\xi = 0,40$ (à direita).	79
4.5	Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Tsallis variando q para $\xi = 0,45$ (à esquerda) e $\xi = 0,50$ (à direita).	79
4.6	Comportamento da Função do Termo de Interferência de Tsallis variando q para $\xi = 0,05$ (à esquerda) e $\xi = 0,10$ (à direita).	85
4.7	Comportamento da Função do Termo de Interferência de Tsallis variando q para $\xi = 0,15$ (à esquerda) e $\xi = 0,20$ (à direita).	85
4.8	Comportamento da Função do Termo de Interferência de Tsallis variando q para $\xi = 0,25$ (à esquerda) e $\xi = 0,30$ (à direita).	85
4.9	Comportamento da Função do Termo de Interferência de Tsallis variando q para $\xi = 0,35$ (à esquerda) e $\xi = 0,40$ (à direita).	86
4.10	Comportamento da Função do Termo de Interferência de Tsallis variando q para $\xi = 0,45$ (à esquerda) e $\xi = 0,50$ (à direita).	86
5.1	Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,05$ (à esquerda) e $\xi = 0,10$ (à direita).	101
5.2	Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,15$ (à esquerda) e $\xi = 0,20$ (à direita).	101
5.3	Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,25$ (à esquerda) e $\xi = 0,30$ (à direita).	101
5.4	Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,35$ (à esquerda) e $\xi = 0,40$ (à direita).	102

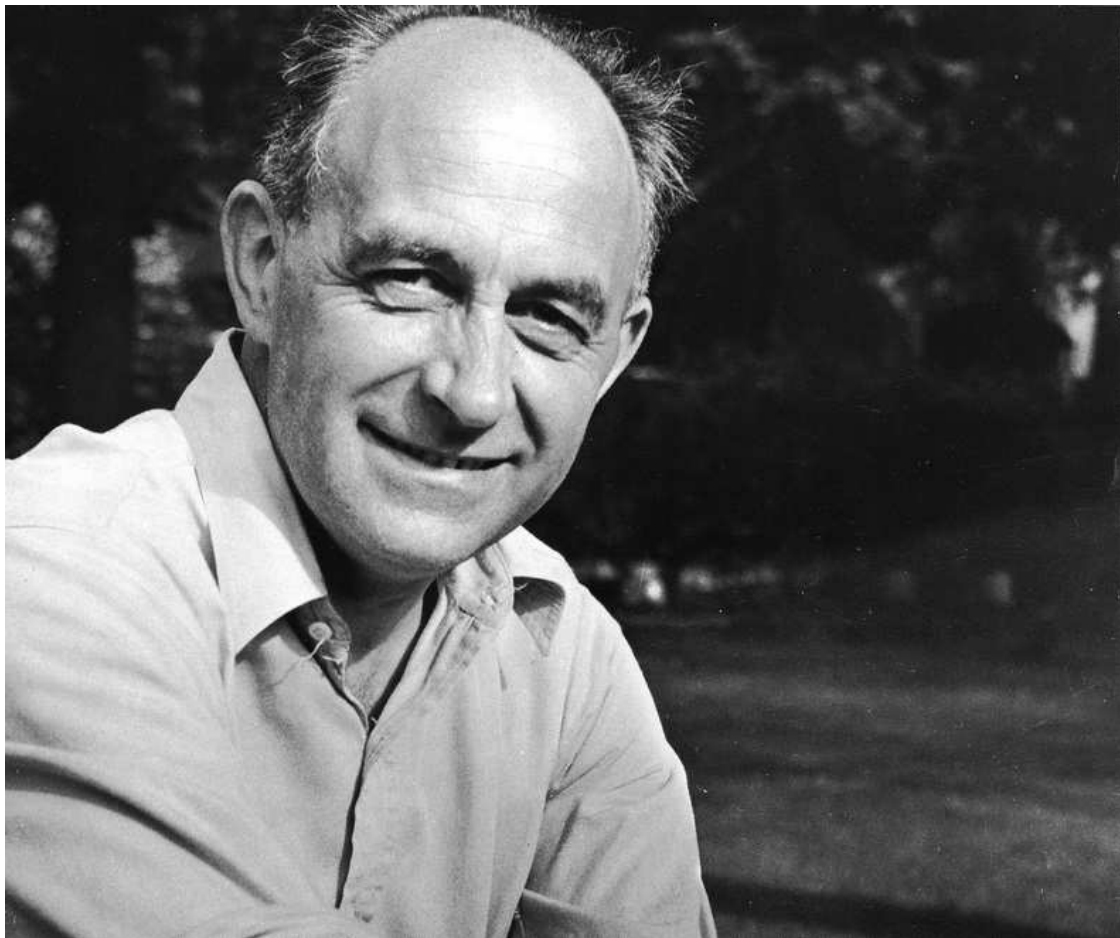
5.5	Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,45$ (à esquerda) e $\xi = 0,50$ (à direita).	102
5.6	Comportamento da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,05$ (à esquerda) e $\xi = 0,10$ (à direita).	108
5.7	Comportamento da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,15$ (à esquerda) e $\xi = 0,20$ (à direita).	108
5.8	Comportamento da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,25$ (à esquerda) e $\xi = 0,30$ (à direita).	108
5.9	Comportamento da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,35$ (à esquerda) e $\xi = 0,40$ (à direita).	109
5.10	Comportamento da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,45$ (à esquerda) e $\xi = 0,50$ (à direita).	109
A.1	Representação do sistema nêutron núcleo alvo.	123

Lista de Tabelas

2.1	Valores da Função de Alargamento Doppler usando a Equação (2.47).	52
2.2	Desvios percentuais não nulos entre $\psi_{BG}(x, \xi)$ e $\psi(x, \xi)$.	52
2.3	Valores da Função do Termo de Interferência usando a Equação (2.48).	53
2.4	Desvios percentuais não nulos entre $\chi_{BG}(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$.	53
3.1	Parâmetros nucleares para os isotópos ^{238}U e ^{239}Pu .	60
3.2	Ordens de grandeza para $R(0, 0)$ para a ressonância de $6,67\text{eV}$ do ^{238}U e a de $0,296\text{eV}$ do ^{239}Pu .	61
3.3	Razão entre o módulo do limite inferior de integração e o desvio padrão para a ressonância de $6,67\text{eV}$ do ^{238}U e a de $0,296\text{eV}$ do ^{239}Pu .	61
4.1	Valores da Função de Alargamento Doppler de Tsallis para $q = 1, 1$ calculados utilizando a Equação (4.19).	73
4.2	Valores da Função de Alargamento Doppler de Tsallis para $q = 1, 2$ calculados utilizando a Equação (4.19).	74
4.3	Valores da Função de Alargamento Doppler de Tsallis para $q = 1, 3$ calculados utilizando a Equação (4.19).	75
4.4	Valores da Função de Alargamento Doppler de Tsallis para $q = 1, 4$ calculados utilizando a Equação (4.19).	76
4.5	Valores da Função de Alargamento Doppler de Tsallis para $q = 1, 5$ calculados utilizando a Equação (4.19).	77
4.6	Valores da Função do Termo de Interferência de Tsallis para $q = 1, 1$ calculados de acordo com a Equação (4.20).	80
4.7	Valores da Função do Termo de Interferência de Tsallis para $q = 1, 2$ calculados de acordo com a Equação (4.20).	81
4.8	Valores da Função do Termo de Interferência de Tsallis para $q = 1, 3$ calculados de acordo com a Equação (4.20).	82
4.9	Valores da Função do Termo de Interferência de Tsallis para $q = 1, 4$ calculados de acordo com a Equação (4.20).	83

4.10	Valores da Função do Termo de Interferência de Tsallis para $q = 1, 5$ calculados de acordo com a Equação (4.20).	84
5.1	Valores da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis para $\kappa = 0, 1$ calculados de acordo com a Equação (5.31).	96
5.2	Valores da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis para $\kappa = 0, 2$ calculados de acordo com a Equação (5.31).	97
5.3	Valores da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis para $\kappa = 0, 3$ calculados de acordo com a Equação (5.31).	98
5.4	Valores da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis para $\kappa = 0, 4$ calculados de acordo com a Equação (5.31).	99
5.5	Valores da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis para $\kappa = 0, 5$ calculados de acordo com a Equação (5.31).	100
5.6	Valores da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis para $\kappa = 0, 1$ calculados de acordo com a Equação (5.32).	103
5.7	Valores da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis para $\kappa = 0, 2$ calculados de acordo com a Equação (5.32).	104
5.8	Valores da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis para $\kappa = 0, 3$ calculados de acordo com a Equação (5.32).	105
5.9	Valores da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis para $\kappa = 0, 4$ calculados de acordo com a Equação (5.32).	106
5.10	Valores da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis para $\kappa = 0, 5$ calculados de acordo com a Equação (5.32).	107
B.1	Pontos de Legendre x_i e seus respectivos pesos ω_i	132

Introdução



Enrico Fermi (1901 - 1954), vencedor do prêmio Nobel de Física de 1938, “Pela demonstração da existência de novos elementos radioativos produzidos pela irradiação neutrônica e pela descoberta de reações nucleares causadas por nêutrons lentos,” dentre diversos outros prêmios.

Imagem extraída de <https://www.flickr.com>. Acesso em 06 de mar de 2018.

Em 02 de dezembro de 2018 completaram 76 anos desde que o primeiro reator nuclear do mundo, o *Chicago Pile-1* (CP-1), contruído pelo laboratório de metalurgia da Universidade de Chicago, foi posto a funcionar, sendo capaz de manter uma reação nuclear em cadeia estável e autossustentável. O feito ocorreu em 2 de dezembro de 1942, tendo o reator desenvolvido uma potência de $0,5\text{ W}$. O CP-1, em seu auge, chegou a desenvolver uma potência máxima de 200 W .

A supervisão da experiência estava sob a tutela do físico italiano naturalizado estadunidense Enrico Fermi, que além de ter sido laureado com o prêmio Nobel de Física (1938), “Pela demonstração da existência de novos elementos radioativos produzidos pela irradiação neutrônica e pela descoberta de reações nucleares causadas por nêutrons lentos,” ainda recebeu diversos outros prêmios, como a Medalha Matteucci (1926), Medalha Hughes (1942), Medalha Franklin (1947), Medalha Max Planck (1954) e *National Inventors Hall of Fame* (1976). Enrico Fermi descreveu CP-1 como “uma pilha de tijolos pretos e vigas de madeira.” A construção da supra-citada “pilha” terminou em 1 de dezembro de 1942. Aproximadamente 350.000 kg de grafite foram usados para construir 57 camadas. Também foram utilizados em torno de 36.600 kg de óxido de urânio e 5.600 kg de urânio metálico na forma de 22.000 pastilhas totalizando mais de US\$1.000.000,00 em material.

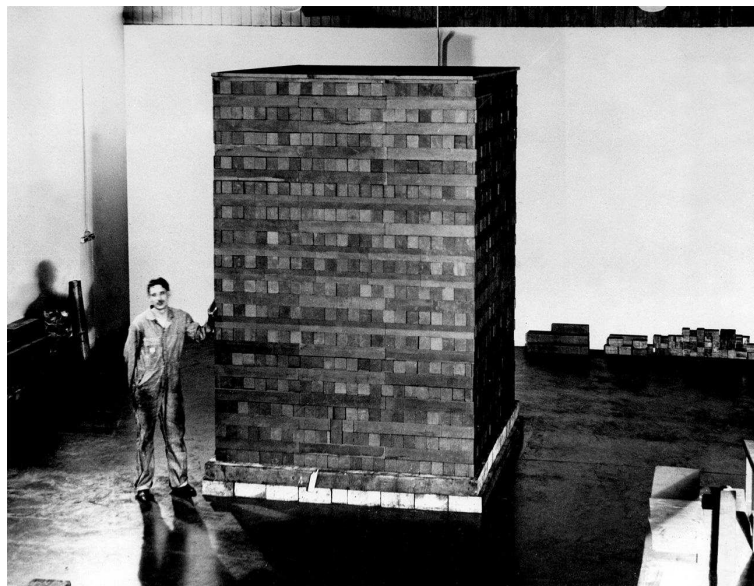


Figura 1: Uma das estruturas de urânio e grafite usadas no CP-1.¹

Não havia nenhum dispositivo de proteção contra radiação e tampouco qualquer sistema de refrigeração. As demais 49 pessoas presentes no momento do primeiro experimento, dentre estudantes, cientistas, carpinteiros, profissionais de saúde e de segurança do laboratório, confiaram nos cálculos realizados por Fermi, e acreditaram

¹Imagem extraída de <https://www.atomicheritage.org>. Acesso em 08 de mar de 2019.

que não haveria perda do controle da reação. Felizmente Fermi estava correto, e todos tiveram a oportunidade de presenciar mais um pôr do sol. Enrico Fermi veio a óbito, prematuramente, aos 53 anos de idade, em 28 de novembro de 1954, em decorrência de um câncer no estômago. Na Figura 1, se vê uma das estruturas de urânio e grafite utilizadas no reator.

O CP-1 foi logo desmontado e reconstruído utilizando concreto como proteção contra radiação no Laboratório Nacional Argonne nas proximidades do local onde fora montado o CP-1, sendo este novo reator batizado como *Chicago Pile-2* (CP-2). O experimento não só provou que a fissão nuclear era capaz de gerar energia, mas também mostrou um método viável para se produzir plutônio. Alguns reatores de grande porte, incluindo o Reator de grafite X-10 em Oak Ridge e o Reator B em Hanford foram, posteriormente, construídos utilizando-se o CP-1 como modelo. O *Experimental Breeder Reactor I* (EBR-I) é um reator de pesquisa, atualmente descomissionado, que é um marco histórico dos EUA. Localizado no deserto a cerca de 29 km a sudeste de Arco, Idaho, foi o primeiro reator a gerar energia elétrica útil, ao produzir eletricidade suficiente para iluminar quatro lâmpadas de 200 W (Figura 2), fato ocorrido às 13 : 50 h em 20 de dezembro de 1951 no horário local. Por este feito, o EBR-I é considerado a primeira usina de potência do mundo.



Figura 2: Primeiras lâmpadas acesas pela eletricidade gerada por um reator nuclear, em 20 de dezembro de 1951. *Experimental Breeder Reactor I* (EBR-I). Idaho, EUA.²

Em 27 de junho de 1954, a primeira usina nuclear do mundo a gerar eletricidade para uma rede elétrica iniciou suas operações na cidade soviética de Obninsk, gerando uma potência de 5 MW. Conhecida como APS-1 Obninsk (*Atomic Power Station 1 Obninsk*), a sua construção começou em 01 de janeiro de 1951, e a primeira

²Imagem extraída de <https://www.atomicheritage.org>. Acesso em 06 de mar de 2018.

criticalidade foi atingida em 06 de maio de 1954. A sua produção de energia para a rede cessou em 1959, quando a usina passou a funcionar como usina de pesquisa e produção de isótopos. A APS-1 Obninsk também foi a primeira usina nuclear a ser desativada na Rússia, em 29 de abril de 2002.

Nestes últimos 3/4 de século, muito se avançou na área, e atualmente existem 449 reatores de potência operando no mundo, gerando quase 400 GW. Além destes, mais 54 reatores, que irão gerar mais de 55 GW, estão em construção.



Figura 3: APS-1 Obninsk (*Atomic Power Station 1 Obninsk*), primeira usina no mundo a fornecer energia elétrica para a rede.³

Desde os primórdios da geração de energia por intermédio de reatores nucleares, foi percebido que para os actínídeos a região de ressonâncias seria a mais difícil para se tratar analiticamente, assim como para se obter valores experimentais que servissem de padrões de comparação. Esta região de ressonâncias corresponde a energia do nêutron compreendida entre 1 eV e 100 keV , sendo a principal região onde há uma forte absorção de nêutrons por núcleos pesados. Um exemplo importante é o ^{238}U , cuja seção de choque exibe ressonâncias pronunciadas nessa região, conforme ilustrado na Figura 4, onde a região de ressonâncias encontra-se em destaque. Conforme pode-se notar na Figura 4, a dependência com a energia da seção de choque apresenta uma estrutura complexa na região de ressonâncias, o que torna bem difícil o tratamento do transporte de nêutrons. Usualmente, se divide a região de ressonâncias em duas: a região de ressonâncias resolvidas, de 1 eV a 100 eV , aproximadamente, e a região de ressonâncias não resolvidas, de 100 eV a 10^5 eV .

³Imagem extraída de <https://www.flickr.com>. Acesso em 02 de abr de 2019.

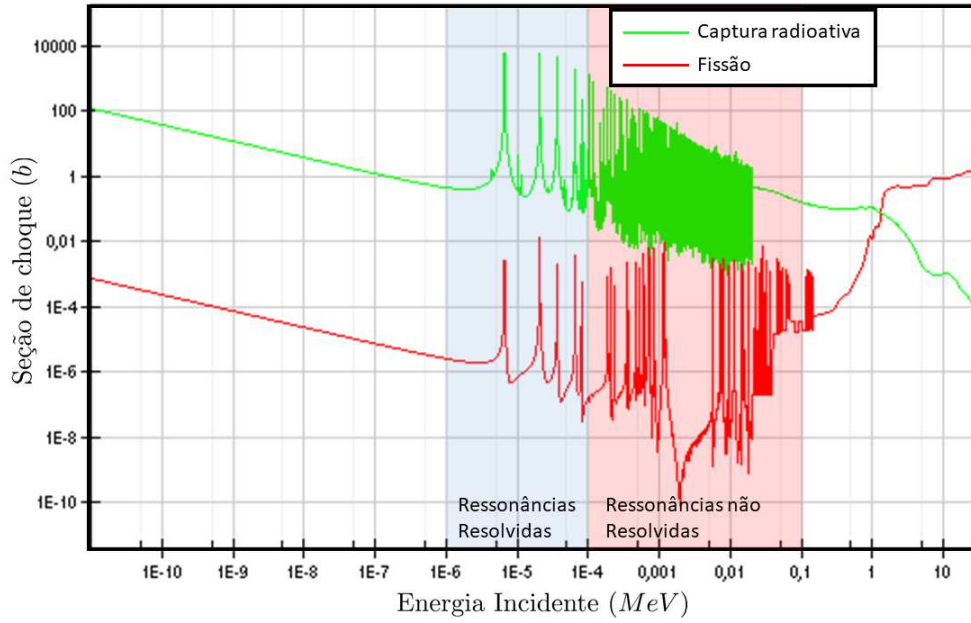


Figura 4: Seção de choque do ^{238}U em função da energia do nêutron na região de ressonâncias.⁴

A região de ressonâncias não resolvidas é caracterizada por uma superposição de ressonâncias, fazendo com que o comportamento da seção de choque seja suave, com seus valores representando médias sobre várias ressonâncias. Já na região de ressonâncias resolvidas, os picos encontram-se separados o suficiente de modo a não ocorrerem sobreposições. Nesta região, a dependência da seção de choque com a energia do nêutron é descrita através de formalismos tais como: Breit-Wigner [1], Adler Adler [2] ou Reich-Moore [3], no qual os parâmetros de ressonância são conhecidos. Algumas consequências da existência de ressonâncias incluem o efeito de autoblindagem, também conhecido como autoproteção, que consiste na atenuação do fluxo de nêutrons na região de ressonâncias, assim como o fenômeno de alargamento Doppler [4–8], que está relacionado com a temperatura da pastilha combustível, levando-se em conta que os nêutrons apresentam velocidades diversas, obedecendo uma certa distribuição estatística, sendo a velocidade relativa entre o nêutron e o núcleo alvo, da qual a seção de choque depende diretamente, podendo ser maior ou menor que a velocidade do nêutron. Esta diferença nas velocidades relativas dá origem ao chamado Fenômeno de Alargamento Doppler no comportamento da seção de choque. Estes dois efeitos são de extrema importância no controle e segurança de reatores, sendo o enfoque desta tese o segundo deles, o chamado Fenômeno de Alargamento Doppler.

O Fenômeno de Alargamento Doppler é adequadamente representado matematicamente na seção de choque microscópica da interação nêutron núcleo através

⁴Imagem extraída de <https://www.nuclear-power.net>. Com adaptações. Acesso em 12 de mar de 2018.

da Função de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$. Fisicamente, esta função descreve o fenômeno do alargamento das ressonâncias isoladas com o aumento da temperatura, o que causa um acréscimo no intervalo de energias no qual é mais provável que um nêutron seja absorvido. Matematicamente, $\psi(x, \xi)$ pode ser interpretada como uma integral de convolução entre uma função gaussiana com uma função lorentziana [9]. No contexto da Física de Reatores, $\psi(x, \xi)$ é bem estabelecida, tendo suas propriedades bem conhecidas, sendo um tema recorrente nos últimos anos [10]. Em outras áreas do conhecimento, a Função de Alargamento Doppler é também conhecida como *Voigt profile* [11–25]. Autores mais modernos [8] nomeiam a Função de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ em conjunto com a Função do Termo de Interferência $\chi(x, \xi)$ como *Funções de Voigt*.

A obtenção das funções de Voigt $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$ é proveniente da confluência de duas grandes áreas do conhecimento: a Mecânica Quântica e a Mecânica Estatística. No que tange à Mecânica Quântica, baseia-se no resultado de 1936 do russo Gregory Breit (1899-1981) e do húngaro Eugene Paul Wigner (1902-1995), que publicaram a fórmula de Breit-Wigner para um nível único [1], que descreve a parte ressonante da seção de choque para um estado com largura natural Γ :

$$\sigma(E) = \frac{\Gamma}{2\pi [(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2]}, \quad (1)$$

sendo E a energia do nêutron incidente e E_r a energia onde a ressonância ocorre. A Equação (1) é uma função do tipo lorentziana e é ainda muito utilizada atualmente pelas seguintes razões:

- É fácil de implementar;
- É possível utilizar parâmetros de ressonâncias já publicados e abundantes na literatura;
- Permite uma aproximação analítica da função $\psi(x, \xi)$;
- Pode ser utilizada de forma analítica em aplicações em Física de Reatores.

O conteúdo relativo à Mecânica Estatística consiste em, usualmente, se considerar os núcleos pesados como um gás cujas moléculas vibram com velocidades distintas, sendo essas distribuídas segundo a estatística de Maxwell-Boltzmann, que pode ser escrita da seguinte forma:

$$F(V) = \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{MV^2}{2k_B T}}, \quad (2)$$

onde:

- M = massa do núcleo;
- k_B = constante de Boltzmann;
- T = temperatura do meio;
- V = módulo da velocidade do núcleo.

A Equação (2) possui um comportamento gaussiano e indica que partículas com altas energias, assim como com energias muito baixas são improváveis.

As Funções de Voigt obtidas neste contexto, além de não possuírem solução analítica, apresentam formas integrais muito complexas. Assim, a possibilidade de se fazer algumas aproximações torna-se muito útil. Para tratar deste problema, Bethe e Placzek, ao lidarem com os efeitos de ressonância em processos nucleares, sugeriram em seu artigo de 1937 [26] algumas aproximações para energias perto do pico ressonante. Bethe e Placzek propuseram três aproximações capazes de simplificar as formas funcionais tanto da Função de Alargamento Doppler quanto da Função do Termo de Interferência.

Para representar a estrutura teórica do estudo do Fenômeno de Alargamento Doppler, a Figura 5 ilustra o esquema de obtenção das Funções de Voigt e algumas de suas aplicações no contexto da Física de Reatores amplamente aceita na academia e utilizada em diferentes códigos computacionais. Com esta representação pictórica, fica evidente como alterações nos formalismos quânticos ou estatísticos geram consequências no alargamento das ressonâncias. A proposta desta tese é estudar algumas generalizações para o Fenômeno de Alargamento Doppler, através da obtenção, em certos contextos, de expressões mais gerais para as Funções de Voigt $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$.

Durante a operação normal de reatores nucleares do tipo *Pressurized Water Reactor* (PWR), a estatística de Maxwell-Boltzmann já se mostrou adequada, sendo utilizada em diferentes códigos, como o NJOY [27]. Entretanto, é sabido que para sistemas que apresentam interações de longo alcance [28–31] bem como aqueles que apresentam correlações temporais de longa duração [32], tal estatística pode se tornar inadequada. Por isso, esforços no sentido de generalizar o conceito da entropia de Maxwell-Gibbs, geradora da função de distribuição de Maxwell-Boltzmann, tem sido feitos ao longo das últimas décadas, gerando estatísticas deformadas ou não gaussianas, as quais são generalizações da estatística de Maxwell-Boltzmann destinadas a descrever sistemas que apresentam algumas restrições à aplicabilidade da Mecânica Estatística usual.

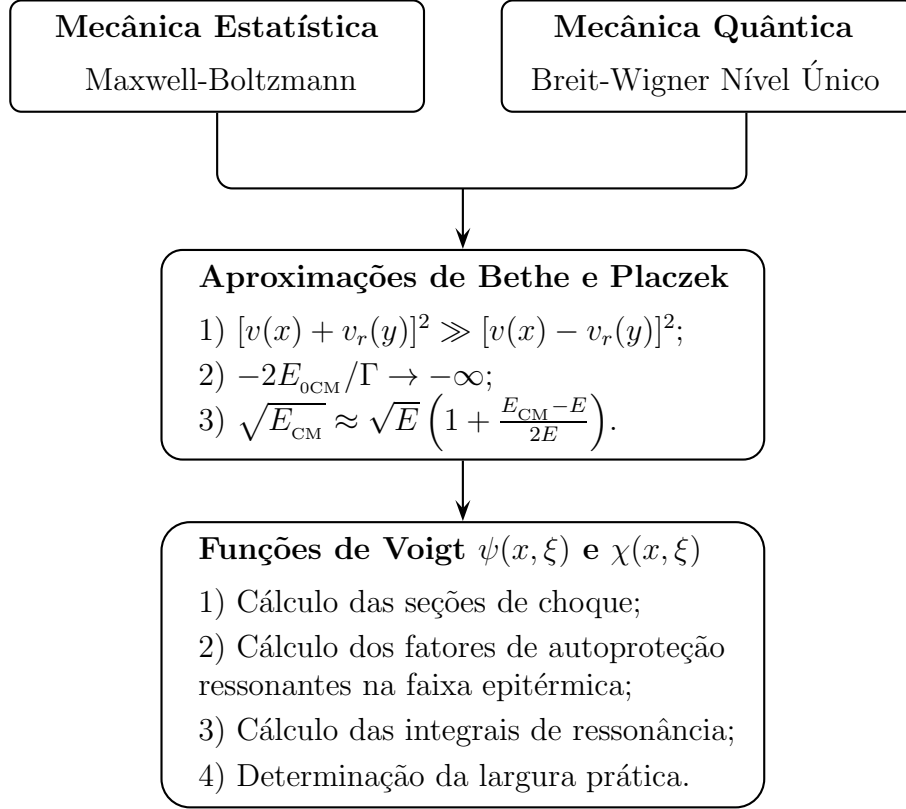


Figura 5: Esquema de obtenção e aplicação das Funções de Voigt no contexto da Física de Reatores.

Neste contexto, pode-se levantar algumas questões: a Equação (2) pode ser generalizada de tal forma a contemplar a descrição de fenômenos fora do equilíbrio e não extensivos, tais como fortes transientes ou simplesmente situações nos quais desvios em relação ao comportamento gaussiano na estatística de Maxwell-Boltzmann fossem observados? Neste caso, como seria o Fenômeno de Alargamento Doppler das ressonâncias? Com o intuito de abordar esta questão, são consideradas no contexto da Física de Reatores, duas estatísticas bem estabelecidas em outras áreas do conhecimento: a estatística de Tsallis [33] e a estatística de Kaniadakis [34]. Nesta tese não se abordada qualquer tipo de tentativa de generalização da teoria advinda da Mecânica Quântica. Assim, o formalismo quântico, baseado na fórmula de nível único proposta por Breit e Wigner em 1936 [1] é mantido.

As expressões obtidas para as Funções de Voigt $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$, conforme já mencionado, não possuem solução analítica, além de apresentarem formas funcionais muito complexas. Deste modo, para se obter o valor destas funções dado um par (x, ξ) , é imprescindível a utilização de métodos numéricos. Com o intuito de se gerar a famosa tabela que contém diversos valores para as funções $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$, presentes em vários livros didáticos da área de Física de Reatores [4, 6, 7], Beynon e Grant, em seu artigo de 1963 [35] descrevem dois métodos que utilizam expansão

em séries, a saber a expansão em polinômios de Chebyshev [36] e o método de Gauss-Hermite [37], possibilitando se obter os valores das Funções de Voigt com custo computacional reduzido, adequando-se assim, à capacidade computacional disponível no início da década de 60. Outra proposta de generalização apresentado nesta tese consiste em se obter expressões para as Funções de Voigt $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$ em termos das grandezas usuais da área da Física de Reatores, porém sem utilizar as aproximações de Bethe e Placzek. Usando como referência a Função de Alargamento Doppler usual, ou seja, considerando as três aproximações, o papel de cada uma das aproximações de Bethe e Placzek é estudado individualmente, bem como suas combinações em pares. Com este estudo, é possível identificar as aproximações mais importantes, e entender a Física envolvida em cada uma delas.

O texto desta tese é organizado da seguinte forma:

No capítulo 1 são apresentadas as três distribuições estatísticas abordadas no texto: A distribuição de Maxwell-Boltzmann [38–41], a distribuição de Tsallis [42] e a distribuição de Kaniadakis [34]. Para estas distribuições, é apresentada uma descrição de seus conceitos fundamentais, assim como suas propriedades, preparando o campo para as suas aplicações nos capítulos que seguem.

No capítulo 2 são obtidas, com riqueza de detalhes, as expressões para as Funções de Voigt: a Função de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e a Função do Termo de Interferência $\chi(x, \xi)$. A importância de tal dedução detalhada é o fato de nos próximos capítulos serem apresentadas as deduções para Funções de Voigt generalizadas, considerando-se outras distribuições estatísticas que não a Maxwelliana. Esse capítulo será a base para considerar o avanço teórico relativo a considerar as estatísticas de Tsallis e de Kaniadakis nos capítulos posteriores. O objetivo didático deste capítulo justifica o detalhamento dos cálculos, que pode parecer excessivo para o leitor já versado em Física de Reatores.

No capítulo 3 é realizada uma análise das aproximações de Bethe Placzek, tratando cada uma delas de forma individual, além de suas combinações em pares quando faz sentido. Deste modo, identifica-se a aproximação mais relevante além do comportamento da qualidade desta conforme se variam os parâmetros envolvidos. Apresenta-se, também, uma pequena discussão dos conceitos físicos envolvidos em cada uma das aproximações.

Nos capítulos 4 e 5 são obtidas as expressões para a Função de Alargamento Doppler e para a Função do Termo de Interferência considerando as distribuições de Tsallis e Kaniadakis, respectivamente. O método da quadratura de Gauss-Legendre com 15 pontos é utilizado para se obter os valores de tais funções, possibilitando, assim, a construção de tabelas e gráficos permitindo o estudo das principais propriedades das funções deformadas obtidas.

O capítulo final é reservado para as conclusões e propostas de continuções deste

trabalho.

Esta tese pode ser dividida em três assuntos que, apesar de estarem interligados, podem ser estudados de forma independente. São eles:

1. Análise das Aproximações de Bethe e Placzek;
2. Fenômeno de Alargamento Doppler considerando a distribuição de velocidades de Tsallis;
3. Fenômeno de Alargamento Doppler considerando a distribuição de velocidades de Kaniadakis.

O leitor interessado na análise das aproximações de Bethe e Placzek, deve ler os capítulos 2 e 3 na íntegra.

O leitor interessado no Fenômeno de Alargamento Doppler considerando a distribuição de velocidades de Tsallis, deve ler as seções 1.1, 1.2, 1.3 e 1.4 do capítulo 1 e os capítulos 2 e 4 na íntegra.

O leitor interessado no Fenômeno de Alargamento Doppler considerando a distribuição de velocidades de Kaniadakis, deve ler as seções 1.1, 1.2 e 1.5 do capítulo 1 e os capítulos 2 e 5 na íntegra.

Capítulo 1

Distribuições Estatísticas Quase-Maxwellianas



Sepultura de Boltzmann no Cemitério Central de Viena.

Imagem extraída de https://pt.wikipedia.org/wiki/Ludwig_Boltzmann. Acesso em 24 de mar de 2019.

Neste capítulo, são apresentadas as três distribuições estatísticas abordadas no texto: A distribuição de Maxwell-Boltzmann e as distribuições quase-maxwellianas de Tsallis e de Kaniadakis. É apresentada uma dedução para a distribuição de Maxwell-Boltzmann, baseada em suposições simples da teoria e, em seguida, são deduzidas as expressões para a velocidade mais provável, a velocidade média e a raiz quadrada da velocidade quadrática média, além de serem apresentados alguns gráficos nos quais é possível visualizar o comportamento da distribuição de Maxwell-Boltzmann ao se variar a massa das moléculas assim como a temperatura. Para as distribuições de Tsallis e Kaniadakis, não são apresentadas as deduções, mas apenas os resultados para as respectivas formas funcionais [34, 42]. Porém, para estas distribuições quase-maxwellianas, todo o restante do conteúdo abordado na distribuição de Maxwell-Boltzmann é refeito. Assim, é possível entender as características destas distribuições, e compará-las com a distribuição de Maxwell-Boltzmann, formando uma base teórica para se entender os efeitos de se considerar tais distribuições no estudo da seção de choque de captura e de espalhamento ressonantes.

1.1 A entropia de Boltzmann-Gibbs

Até a metade século XIX acreditava-se na teoria do *calórico*, concepção na qual o calor era considerado um fluído invisível e inodoro, que todos os corpos conteriam em sua composição, sendo este fluído o responsável pelas alterações de temperatura. Nesta concepção, se a temperatura de um sistema aumentava, significava que este recebera calórico de alguma fonte. Análogamente, uma queda de temperatura era entendida como perda de calórico. Na época, uma minoria de cientistas associava o calor à energia resultante do movimento aleatório dos átomos, sendo uma maior temperatura associada à um movimento vibracional mais vigoroso dos mesmos.

Maxwell foi o primeiro físico a tratar os gases como um conjunto de pequenas partículas movendo-se com velocidades variadas, chocando-se umas com as outras, assim como com as paredes do recipiente que o contém. Neste contexto, entendendo o gás como um grande número de moléculas em movimento aleatório, Maxwell foi capaz de determinar as suas propriedades, e também foi o primeiro a descrever as propriedades moleculares de um gás aplicando métodos probabilísticos e estatísticos e, por este fato, é considerado um dos fundadores da Teoria Cinética dos Gases.

De acordo com a mecânica newtoniana, é possível para cada uma das partículas componentes de um sistema retroceder em seu percurso e retornar à suas condições iniciais, sendo sempre possível, neste sentido, que o sistema como um todo retorne ao seu estado inicial, contradizendo o fato de um estado termodinâmico envolver reversibilidade no sentido do estado de entropia estacionária. Em 1872, Boltzmann, utilizando os métodos estatísticos propostos por Maxwell, para descrever as proprie-

dades da matéria a partir das propriedades dos átomos, determinou um novo e mais geral tratamento para a entropia. A solução proposta por Boltzmann para este paradoxo reside na interpretação da entropia como uma propriedade estatística. Nesta visão, a reversibilidade é possível, porém sua probabilidade de ocorrência é ínfima. Introduzindo teoria de probabilidades na segunda lei da Termodinâmica, Boltzmann apresenta pela primeira vez uma lei da natureza probabilística, enquanto todas as conhecidas até então eram determinísticas. Em seu artigo de 1877, originalmente escrito em alemão, intitulado “Sobre a relação entre o segundo teorema fundamental da teoria mecânica do calor e o cálculo de probabilidades com respeito às condições sobre o equilíbrio térmico” [43, 44], Boltzmann formula uma expressão onde a entropia de um sistema fechado seria proporcional ao volume do espaço de fase Ω ocupado pelo macroestado do sistema, ou seja:

$$S \propto \log \Omega. \quad (1.1)$$

Atualmente, é mais comum a seguinte notação:

$$S = k_B \ln W, \quad (1.2)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann e W é o número de microestados do sistema compatíveis com o macroestado observado.

A interpretação estatística revela a entropia como uma medida da desordem entre as partículas, considerando o número de microestados de um sistema como uma medida da desordem do mesmo. Na Equação (1.2), um maior número de microestados acessíveis acarreta em uma maior entropia para o sistema. A versão de Boltzmann para a entropia indica que é possível obter mais informação sobre um sistema com entropia baixa, conseqüente mais ordenado, do que sobre um sistema com entropia elevada. Esta relação entre aumento da entropia e diminuição da informação não se tornou explícita durante muitos anos.

Williard Gibbs percebeu nos trabalhos de Boltzmann e Maxwell a possibilidade do estudo de corpos com complexidade arbitrária obedecendo as leis da mecânica, e introduziu uma generalização da Equação (1.2), conhecida como entropia de Boltzmann-Gibbs:

$$S = -k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i, \quad (1.3)$$

onde p_i é a probabilidade de o sistema encontrar-se em um microestado i e W é o número total de microestados. Assim, a seguinte condição é válida:

$$\sum_{i=1}^W p_i = 1. \quad (1.4)$$

Quando todos os microestados são equiprováveis, é fácil mostrar que a Equação (1.3) se reduz ao resultado da Equação (1.2).

Dado um sistema composto $A \cup B$, constituído de dois subsistemas A e B , a Equação (1.3) fornece a entropia abaixo:

$$S^{A \cup B} = -k_B \sum_{i=1}^{W_A} \sum_{j=1}^{W_B} p_{ij}^{A \cup B} \ln p_{ij}^{A \cup B}. \quad (1.5)$$

Se A e B são sistemas independentes, tais que a probabilidade de o sistema estar em um microestado de $A \cup B$ possa ser fatorizada nas probabilidades de parte dele estar no estado A e parte no estado B , de acordo com:

$$p_{ij}^{A \cup B} = p_i^A p_j^B, \quad (1.6)$$

tem-se que:

$$S^{A \cup B} = -k_B \sum_{i=1}^{W_A} \sum_{j=1}^{W_B} p_i^A p_j^B \ln p_i^A p_j^B = -k_B \sum_{i=1}^{W_A} \sum_{j=1}^{W_B} p_i^A p_j^B (\ln p_i^A + \ln p_j^B), \quad (1.7)$$

o que leva ao seguinte:

$$S^{A \cup B} = -k_B \sum_{i=1}^{W_A} \sum_{j=1}^{W_B} p_i^A p_j^B \ln p_i^A - k_B \sum_{i=1}^{W_A} \sum_{j=1}^{W_B} p_i^A p_j^B \ln p_j^B. \quad (1.8)$$

Arrumando os termos de uma forma mais conveniente, chega-se ao resultado:

$$S^{A \cup B} = \left(-k_B \sum_{i=1}^{W_A} p_i^A \ln p_i^A \right) \left(\sum_{j=1}^{W_B} p_j^B \right) + \left(-k_B \sum_{j=1}^{W_B} p_j^B \ln p_j^B \right) \left(\sum_{i=1}^{W_A} p_i^A \right). \quad (1.9)$$

Utilizando as Equações (1.3) e (1.4), se tem finalmente que:

$$S^{A \cup B} = S^A + S^B, \quad (1.10)$$

que é o resultado conhecido como aditividade ou extensividade da entropia.

1.2 A distribuição de Maxwell-Boltzmann

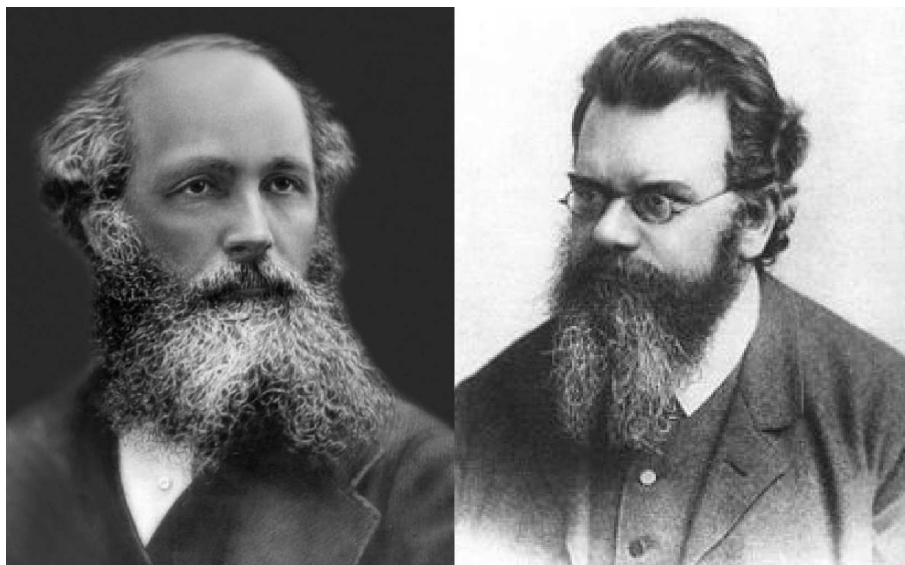


Figura 1.1: James Clerk Maxwell (1831 - 1879) e Ludwig Boltzmann (1844 - 1906).¹

As moléculas em um gás com temperatura T não se movem todas com a mesma velocidade. Algumas possuem velocidades bem altas, outras bem baixa, e muitas delas velocidades intermediárias entres estes valores altos e baixos. Assim, se perguntar sobre a velocidade de uma molécula em um gás não faz sentido, já que uma molécula deste suposto gás pode possuir qualquer velocidade entre diversas possíveis. Assim, faz mais sentido perguntar sobre propriedades globais, tais como: “Qual a velocidade média das moléculas?” “Qual a velocidade mais provável?” Todas as perguntas deste tipo podem ser respondidas se for conhecida a *distribuição de velocidades do gás* a uma certa temperatura. No final dos anos 1800, James Clerk Maxwell e Ludwig Boltzmann forneceram uma resposta para este problema. O resultado por eles obtido recebe o nome de distribuição de Maxwell-Boltzmann, e mostra como as velocidades das moléculas são distribuídas em um gás ideal. Na sequência, vemos uma dedução de tal distribuição, baseada em algumas suposições simples.

Seja uma molécula de um gás em equilíbrio térmico, com velocidade \vec{V} cujas componentes sejam V_x , V_y e V_z . Denotamos a probabilidade da componente V_i estar no intervalo $[V_i, V_i + dV_i]$ por $f(V_i)$, com $i = x, y, z$. Em princípio, não é trivial que o valor provável para uma certa componente da velocidade não seja afetada pelo valor já determinado para alguma das outras componentes. Em um primeiro momento, Maxwell supôs que esta independência das probabilidades, conhecida como suposição da loteria, fosse válida na teoria dos gases, e posteriormente a provou.

¹Imagens extraídas de <http://www.technologycorp.com.au>. e <https://en.wikipedia.org>. Acesso em 26 de set de 2018.

O vetor velocidade \vec{V} pertence ao elemento de volume $dV_x dV_y dV_z$ do espaço de velocidades, e a probabilidade de que a extremidade de \vec{V} esteja neste elemento de volume, por conta da suposição da loteria, é dada por:

$$f(V_x)f(V_y)f(V_z)dV_x dV_y dV_z. \quad (1.11)$$

Levando em conta a isotropia de todas as direções das velocidades e, portanto, o fato de que elas são todas igualmente prováveis, pode-se introduzir uma função desconhecida $F(V)$ que dependa apenas do módulo da velocidade:

$$F(V)d^3V, \quad d^3V = dV_x dV_y dV_z. \quad (1.12)$$

A função $F(V)$ é a chamada *distribuição de velocidades*, e é justamente a que pretende-se determinar. Comparando as Equações (1.11) e (1.12), é fácil perceber que:

$$F(V) = f(V_x)f(V_y)f(V_z), \quad (1.13)$$

onde:

$$V = \sqrt{V_x^2 + V_y^2 + V_z^2}. \quad (1.14)$$

Em primeiro lugar, faz-se uma derivada logarítmica na Equação (1.13) com relação a V_x :

$$\frac{\partial}{\partial V_x} \ln F(V) = \frac{\partial}{\partial V_x} \ln [f(V_x)f(V_y)f(V_z)]. \quad (1.15)$$

Após se tomar a derivada, chega-se ao seguinte:

$$\frac{1}{VF(V)} \frac{dF(V)}{dV} = \frac{1}{V_x f(V_x)} \frac{df(V_x)}{dV_x}, \quad (1.16)$$

onde, no lado direito, as derivadas que geram termos nulos já foram omitidas. Nota-se que na parte esquerda da Equação (1.16) se tem uma dependência apenas na variável V , ao passo que no lado direito, a dependência é apenas na variável V_x . Deste modo, definindo as funções:

$$\Phi(V) = \frac{1}{VF(V)} \frac{dF(V)}{dV}, \quad (1.17)$$

e

$$\phi(V_x) = \frac{1}{V_x f(V_x)} \frac{df(V_x)}{dV_x}, \quad (1.18)$$

pode-se escrever:

$$\Phi(V) = \phi(V_x). \quad (1.19)$$

Tomando-se a derivada com relação a V_y ou V_z , se obtém o seguinte:

$$\frac{d\Phi(V)}{dV} = 0 \Rightarrow \Phi(V) = \phi(V_x) = -2\alpha, \quad (1.20)$$

onde se escolhe a constante de integração como -2α por conveniência. Assim, com a Equação (1.18), chega-se ao resultado:

$$\frac{1}{f(V_x)} \frac{df(V_x)}{dV_x} = -2\alpha V_x \Rightarrow \ln f(V_x) = \gamma - \alpha V_x^2, \quad (1.21)$$

cujas solução é dada por:

$$f(V_x) = B e^{-\alpha V_x^2}, \quad (1.22)$$

onde se fez $B = e^\gamma$. Determina-se a relação entre as constantes α e B pela certeza de se encontrar a componente V_x da velocidade no intervalo de $-\infty$ a $+\infty$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(V_x) dV_x = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} B e^{-\alpha V_x^2} dV_x = 1 \Rightarrow B \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = 1, \quad (1.23)$$

onde foi usada a integral de Euler-Poisson [36]. Assim, temos:

$$B = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}. \quad (1.24)$$

Para determinar o valor de α , usa-se a energia cinética média associada ao grau de liberdade relativo à componente V_x [39–41]:

$$\frac{M}{2} \langle V_x^2 \rangle = \frac{BM}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} V_x^2 e^{-\alpha V_x^2} dV_x = \frac{k_B T}{2}. \quad (1.25)$$

Notando que $V_x^2 e^{-\alpha V_x^2} = -\frac{d}{d\alpha} e^{-\alpha V_x^2}$, é possível escrever:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} V_x^2 e^{-\alpha V_x^2} dV_x &= \int_{-\infty}^{+\infty} -\frac{d}{d\alpha} e^{-\alpha V_x^2} dV_x = -\frac{d}{d\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha V_x^2} dV_x = \\ &= -\frac{d}{d\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{-1/2} \frac{d}{d\alpha} \left(\frac{\pi}{\alpha}\right) = \\ &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \left(-\frac{\pi}{\alpha^2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^{3/2}}. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Com as Equações (1.24), (1.25) e (1.26), chega-se ao seguinte resultado:

$$\alpha = \frac{M}{2k_B T}, \quad B = \sqrt{\frac{M}{2\pi k_B T}}, \quad (1.27)$$

o que faz a Equação (1.22) assumir a forma:

$$f(V_x) = \sqrt{\frac{M}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{MV_x^2}{2k_B T}}. \quad (1.28)$$

De forma análoga, chega-se aos resultados:

$$f(V_y) = \sqrt{\frac{M}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{MV_y^2}{2k_B T}}, \quad (1.29)$$

$$f(V_z) = \sqrt{\frac{M}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{MV_z^2}{2k_B T}}, \quad (1.30)$$

e finalmente, a Equação (1.13) assume a forma abaixo:

$$F(V) = \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{MV^2}{2k_B T}}. \quad (1.31)$$

A Equação (1.31) fornece a probabilidade de encontrar a partícula do gás com velocidade entre \vec{V} e $\vec{V} + d\vec{V}$. Sendo esta distribuição dependente apenas do módulo da velocidade, fica evidente que:

$$\langle V_x \rangle = \langle V_y \rangle = \langle V_z \rangle = 0. \quad (1.32)$$

Devido à isotropia das velocidades, também pode-se escrever:

$$F(V)d^3V = F(V)4\pi V^2 dV = F_0(V)dV, \quad (1.33)$$

sendo a densidade de probabilidade dos módulos das velocidades dada por:

$$F_0(V) = 4\pi \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} V^2 e^{-\frac{MV^2}{2k_B T}}. \quad (1.34)$$

O valor mais provável para o módulo das velocidades corresponde ao valor onde $F_0(V)$ possui um ponto de máximo, e pode ser obtido facilmente pela seguinte condição:

$$\left. \frac{dF_0(V)}{dV} \right|_{V_{mp}} = 0. \quad (1.35)$$

Derivando a Equação (1.34):

$$\frac{dF_0(V)}{dV} = 4\pi \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \left(2V - \frac{2MV^3}{2k_B T} \right) e^{-\frac{MV^2}{2k_B T}}. \quad (1.36)$$

Com o resultado da Equação (1.36), as soluções possíveis para a Equação (1.35) são $V_{mp} = 0$ e $V_{mp} = \sqrt{\frac{2k_B T}{M}}$, o que leva a concluir que a velocidade mais provável

é dada por:

$$V_{mp} = \sqrt{\frac{2k_B T}{M}}. \quad (1.37)$$

A velocidade média, por definição, é dada por:

$$\langle V \rangle = \int_0^{+\infty} V F_0(V) dV = 4\pi \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_0^{+\infty} V^3 e^{-\frac{MV^2}{2k_B T}} dV, \quad (1.38)$$

e sabendo que [45]:

$$\int_0^{+\infty} x^m e^{-\beta x^n} dx = \frac{\Gamma(\gamma)}{n\beta^\gamma}, \quad \gamma = \frac{m+1}{n}, \quad [\beta > 0, m > 0, n > 0], \quad (1.39)$$

a Equação (1.38) fornece:

$$\langle V \rangle = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi M}}. \quad (1.40)$$

Finalmente, a velocidade média quadrática é dada por:

$$\langle V^2 \rangle = \int_0^{+\infty} V^2 F_0(V) dV = 4\pi \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_0^{+\infty} V^4 e^{-\frac{MV^2}{2k_B T}} dV, \quad (1.41)$$

onde usa-se novamente a Equação (1.39), chegando-se ao seguinte resultado:

$$\langle V^2 \rangle = \frac{3k_B T}{M}. \quad (1.42)$$

A raiz quadrada da velocidade quadrática média é então:

$$V_{rms} = \sqrt{\langle V^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3k_B T}{M}}. \quad (1.43)$$

Deve-se perceber que:

$$V_{rms} > \langle V \rangle > V_{mp}. \quad (1.44)$$

Na Figura 1.2, vemos ilustrada a distribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases nobres. Percebe-se que quanto menor for a massa das moléculas do gás, mais alargada fica a distribuição, e consequentemente, maior fica a velocidade mais provável.

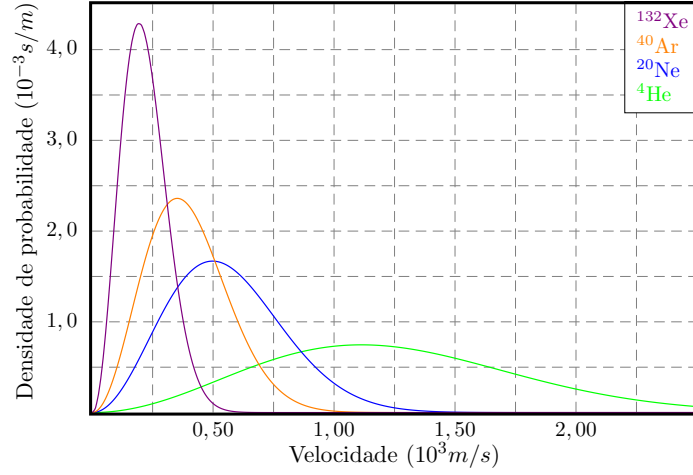


Figura 1.2: Distribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases nobres com temperatura $T = 300\text{ K}$.

Na Figura 1.3 estão representadas, para o ^{20}Ne a temperatura de 300 K , os valores de V_{mp} , $\langle V \rangle$ e V_{rms} , ilustrando o resultado apresentado na Equação (1.44).

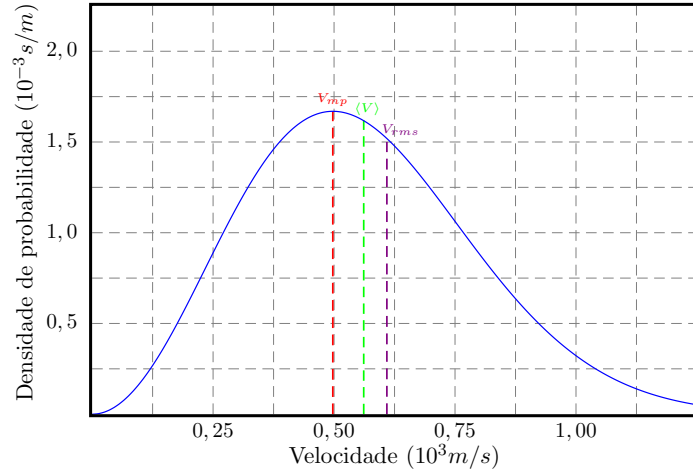


Figura 1.3: V_{mp} , $\langle V \rangle$ e V_{rms} para o ^{20}Ne com temperatura $T = 300\text{ K}$.

Na Figura (1.4), pode-se observar o comportamento da distribuição de Maxwell-Boltzmann para o ^{132}Xe para diversas temperaturas. Percebe-se que com o aumento da temperatura a distribuição fica mais alargada, acarretando em um maior valor para a velocidade mais provável.

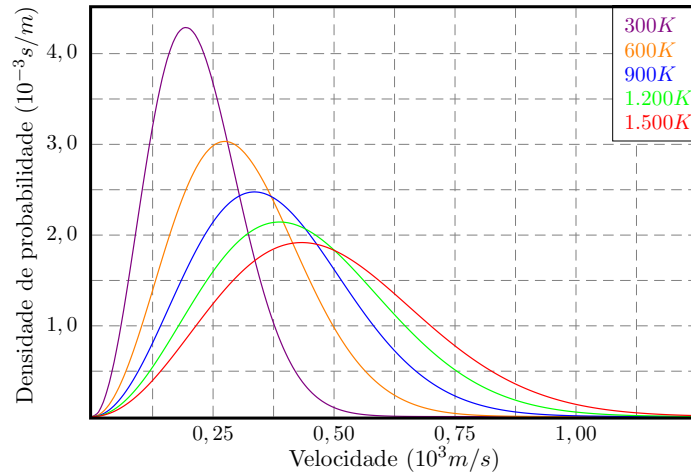


Figura 1.4: Distribuição de Maxwell-Boltzmann para o ^{132}Xe para diversas temperaturas.

1.3 A entropia de Tsallis

A Mecânica Estatística e a Termodinâmica não-extensivos foram introduzidos em 1988 [33] por Constantino Tsallis (Figura 1.5), e posteriormente desenvolvidos em 1991 [46] e 1998 [47], com o intuito de se estender o domínio de aplicabilidade de procedimentos da Mecânica Estatística para situações onde a termoestatística de Boltzmann-Gibbs e a termodinâmica padrão apresentam dificuldades matemáticas severas ou até mesmo deixam de funcionar.



Figura 1.5: Constantino Tsallis (1943 -).²

A estatística de Tsallis é baseada na generalização da termoestatística de Boltzmann-Gibbs, com dependência funcional explícita em um parâmetro q res-

²Imagem extraída de <https://www.elines.com>. Acesso em 26 de set de 2018.

ponsável por medir o desvio em relação a esta. A entropia postulada por Constantino Tsallis em 1988 possui a seguinte forma:

$$S_q \equiv k_B \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q-1}, \quad (1.45)$$

onde W é o número total de combinações microscópicas possíveis, p_i a probabilidade de o sistema se encontrar no estado i , continuando válida a condição dada pela Equação (1.4). Fazendo uso da Equação (1.4), a Equação (1.45) pode ser escrita como:

$$S_q = \frac{k_B}{q-1} \sum_{i=1}^W p_i (1 - p_i^{q-1}), \quad (1.46)$$

o que torna explícito o fato de que $S_q \geq 0$ em qualquer situação.

A fim de se verificar o resultado onde a deformação é removida, toma-se o limite $q \rightarrow 1$ na Equação (1.46):

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow 1} S_q &= k_B \lim_{q \rightarrow 1} \frac{1}{q-1} \sum_{i=1}^W p_i (1 - p_i^{q-1}) = \\ &= k_B \lim_{q \rightarrow 1} \frac{1}{q-1} \sum_{i=1}^W p_i (1 - e^{\ln p_i^{q-1}}) = \\ &= k_B \lim_{q \rightarrow 1} \frac{1}{q-1} \sum_{i=1}^W p_i (1 - e^{(q-1) \ln p_i}). \end{aligned} \quad (1.47)$$

Usando expansão em série de Taylor para a exponencial presente na Equação (1.47):

$$\begin{aligned} e^{(q-1) \ln p_i} &= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{[(q-1) \ln p_i]^n}{n!} = \\ &= 1 + \frac{(q-1) \ln p_i}{1!} + \sum_{n=2}^{+\infty} \frac{[(q-1) \ln p_i]^n}{n!}, \end{aligned} \quad (1.48)$$

o limite assume a forma:

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow 1} S_q &= k_B \lim_{q \rightarrow 1} \sum_{i=1}^W \frac{p_i}{q-1} \left[-(q-1) \ln p_i - \sum_{n=2}^{+\infty} \frac{[(q-1) \ln p_i]^n}{n!} \right] = \\ &= k_B \lim_{q \rightarrow 1} \left[- \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i - \sum_{i=1}^W \sum_{n=2}^{+\infty} \frac{(q-1)^{n-1} p_i (\ln p_i)^n}{n!} \right]. \end{aligned} \quad (1.49)$$

Tomando o limite $q \rightarrow 1$ na Equação (1.49), o somatório duplo gera um limite

nulo, o que fornece:

$$\lim_{q \rightarrow 1} S_q = -k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i, \quad (1.50)$$

que é justamente a entropia de Boltzmann-Gibbs, dada pela Equação (1.3).

Dado um sistema composto $A \cup B$, constituído de dois subsistemas A e B , a Equação (1.45) fornece a seguinte q -entropia:

$$S_q^{A \cup B} = \frac{k_B}{q-1} \left[1 - \sum_{i=1}^{W_A} \sum_{j=1}^{W_B} (p_{ij}^{A \cup B})^q \right]. \quad (1.51)$$

Se A e B são sistemas independentes, tais que a probabilidade de o sistema estar em um microestado de $A \cup B$ possa ser fatorizada nas probabilidades de parte dele estar no estado A e parte no estado B , de acordo com a Equação (1.6), se tem que:

$$S_q^{A \cup B} = \frac{k_B}{q-1} \left[1 - \sum_{i=1}^{W_A} \sum_{j=1}^{W_B} (p_i^A p_j^B)^q \right]. \quad (1.52)$$

Somando e subtraindo o termo $1 - \sum_{i=1}^{W_A} (p_i^A)^q - \sum_{j=1}^{W_B} (p_j^B)^q$ na Equação (1.52), chega-se ao resultado abaixo:

$$S_q^{A \cup B} = \frac{k_B}{q-1} \left\{ 1 - \sum_{i=1}^{W_A} (p_i^A)^q + 1 - \sum_{j=1}^{W_B} (p_j^B)^q + \right. \\ \left. - \left[1 - \sum_{i=1}^{W_A} (p_i^A)^q - \sum_{j=1}^{W_B} (p_j^B)^q + \sum_{i=1}^{W_A} (p_i^A) \sum_{j=1}^{W_B} (p_j^B)^q \right] \right\}, \quad (1.53)$$

onde o termo entre colchetes na Equação (1.53) pode ser escrito como:

$$1 - \sum_{i=1}^{W_A} (p_i^A)^q - \sum_{j=1}^{W_B} (p_j^B)^q + \sum_{i=1}^{W_A} (p_i^A) \sum_{j=1}^{W_B} (p_j^B)^q = \\ = \left[1 - \sum_{i=1}^{W_A} (p_i^A)^q \right] - \sum_{j=1}^{W_B} (p_j^B)^q \left[1 - \sum_{i=1}^{W_A} (p_i^A)^q \right] = \\ = \left[1 - \sum_{i=1}^{W_A} (p_i^A)^q \right] \left[1 - \sum_{j=1}^{W_B} (p_j^B)^q \right], \quad (1.54)$$

o que permite escrever:

$$S_q^{A \cup B} = \frac{k_B}{q-1} \left[1 - \sum_{i=1}^{W_A} (p_i^A)^q \right] + \frac{k_B}{q-1} \left[1 - \sum_{j=1}^{W_B} (p_j^B)^q \right] + \\ - \frac{q-1}{k_B} \left\{ \frac{k_B}{q-1} \left[1 - \sum_{i=1}^{W_A} (p_i^A)^q \right] \frac{k_B}{q-1} \left[1 - \sum_{j=1}^{W_B} (p_j^B)^q \right] \right\}. \quad (1.55)$$

Finalmente, com auxílio da Equação (1.45), chega-se ao seguinte resultado:

$$S_q^{A \cup B} = S_q^A + S_q^B + \frac{(1-q)}{k_B} S_q^A S_q^B. \quad (1.56)$$

No limite $q \rightarrow 1$, S_q se reduz ao resultado da Equação (1.3), como já demonstrado, e a Equação (1.56) reproduz o resultado da aditividade da entropia. Observa-se que $q < 1$ corresponde à entropia superaditiva (superextensiva), $q = 1$ a aditiva (extensiva) e $q > 1$ à subaditiva (subextensiva).

1.4 A distribuição de Tsallis

1.4.1 Expressões matemáticas e propriedades

Em seu artigo de 1998, Silva, et. al. [42] deduzem uma expressão para a distribuição de velocidades de Tsallis, generalizando, assim, o resultado dado pela Equação (1.31). Para trabalhar com o resultado obtido, é necessário introduzir as funções q -exponencial e q -logarítmica, definidas por:

$$\exp_q(z) = [1 + (1-q)z]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (1.57)$$

$$\ln_q(z) = \frac{z^{1-q} - 1}{1-q}, \quad (1.58)$$

onde é fácil de se verificar que $\exp_q(\ln_q(z)) = \ln_q(\exp_q(z)) = z$. Além disso, também se mostra facilmente que a derivação q -logarítmica possui a seguinte forma:

$$\frac{d}{dz} \ln_q(z) = \frac{1}{z^q}. \quad (1.59)$$

Os limites das funções definidas pelas Equações (1.57) e (1.58) quando $q \rightarrow 1$ reproduzem, respectivamente, as funções exponencial e logarítmica na base e , como será mostrado na subseção 1.4.2. O resultado do supracitado artigo é dado pela expressão:

$$F_q(V) = A_q \left[1 - (q-1) \frac{MV^2}{2k_B T} \right]^{\frac{1}{q-1}}, \quad (1.60)$$

onde pode-se notar que para $q > 1$, a positividade do argumento da potência significa que a Equação (1.60) apresenta um corte térmico nos valores máximos permitidos para a velocidade. Os módulos das velocidades são tais que:

$$0 \leq V \leq V_q, \quad (1.61)$$

onde

$$V_q = \sqrt{\frac{2k_B T}{M(q-1)}}. \quad (1.62)$$

Usando a Equação (1.57), pode-se rescrever a Equação (1.60) do seguinte modo:

$$F_q(V) = A_q \exp_{2-q} \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right). \quad (1.63)$$

onde a contante A_q deve ser obtida por uma condição de normalização.

Levando em consideração a isotropia das velocidades, pode-se escrever:

$$F_q(V) d^3V = F_q(V) 4\pi V^2 dV = F_{q0}(V) dV, \quad (1.64)$$

sendo a densidade de probabilidade dos módulos das velocidades dada por:

$$F_{q0}(V) = 4\pi A_q V^2 \left[1 - (q-1) \frac{MV^2}{2k_B T} \right]^{\frac{1}{q-1}}, \quad (1.65)$$

e a constante de normalização A_q determinada pela condição abaixo:

$$\int_0^{V_q} F_{q0}(V) dV = 1. \quad (1.66)$$

Substituindo a Equação (1.65) na (1.66) e fazendo uma substituição simples do tipo

$$u = \frac{M(q-1)V^2}{2k_B T} \Rightarrow du = \frac{M(q-1)V}{k_B T} dV, \quad (1.67)$$

chega-se ao seguinte resultado:

$$2\pi A_q \left[\frac{2k_B T}{M(q-1)} \right]^{3/2} \int_0^1 u^{1/2} (1-u)^{\frac{1}{q-1}} du = 1. \quad (1.68)$$

Utilizando-se a definição da função beta, e a propriedade que a relaciona com funções gama [37]:

$$B(z, w) = \int_0^1 u^{z-1} (1-u)^{w-1} du = \frac{\Gamma(z)\Gamma(w)}{\Gamma(z+w)}, \quad (z > 0, w > 0), \quad (1.69)$$

a Equação (1.68) assume a forma:

$$2\pi A_q \left[\frac{2k_B T}{M(q-1)} \right]^{3/2} \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{q-1} + 1\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} + \frac{5}{2}\right)} = 1. \quad (1.70)$$

Sabendo que $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$ e utilizando a propriedade [37]:

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z), \quad (1.71)$$

chega-se ao resultado abaixo:

$$A_q = (q-1)^{1/2} \frac{(3q-1)}{2} \frac{(1+q)}{2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \left(\frac{M}{2\pi k_B T}\right)^{3/2}. \quad (1.72)$$

Para encontrar a velocidade mais provável, precisa-se da derivada da densidade de probabilidade do módulo das velocidades, dada pela Equação (1.65). Tomando tal derivada, se tem o seguinte:

$$\begin{aligned} \frac{dF_q(V)}{dV} &= 4\pi A_q V \left\{ 2 - \frac{MV^2}{k_B T} \left[1 - \frac{(q-1)MV^2}{2k_B T} \right]^{-1} \right\} \times \\ &\times \left[1 - (q-1) \frac{MV^2}{2k_B T} \right]^{\frac{1}{q-1}}. \end{aligned} \quad (1.73)$$

De posse deste resultado, a condição para se encontrar a velocidade mais provável:

$$\left. \frac{dF_q(V)}{dV} \right|_{V_{qmp}} = 0, \quad (1.74)$$

leva ao seguinte:

$$V_{qmp} = \sqrt{\frac{2k_B T}{qM}}. \quad (1.75)$$

A velocidade média é dada por:

$$\langle V \rangle_q = \int_0^{+\infty} V F_{q0}(V) dV = 4\pi A_q \int_0^{+\infty} V^3 \left[1 - (q-1) \frac{MV^2}{2k_B T} \right]^{\frac{1}{q-1}} dV. \quad (1.76)$$

Fazendo novamente a substituição definida na Equação (1.67), tem-se ao seguinte:

$$\langle V \rangle_q = 8\pi A_q \left[\frac{k_B T}{M(q-1)} \right]^2 \int_0^{+\infty} u(1-u)^{\frac{1}{q-1}} du. \quad (1.77)$$

Utilizando a Equação (1.69), chega-se finalmente ao resultado abaixo:

$$\langle V \rangle_q = \frac{8\pi A_q}{q(2q-1)} \left(\frac{k_B T}{M} \right)^2, \quad (1.78)$$

que após substituição da Equação (1.72) e um pouco de manipulação algébrica leva ao seguinte:

$$\langle V \rangle_q = \frac{(q-1)^{1/2}(3q-1)(q+1)}{4q(2q-1)} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{q-1} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi M}}. \quad (1.79)$$

Por fim, a velocidade média quadrática é dada por:

$$\langle V^2 \rangle_q = \int_0^{+\infty} V^2 F_{q0}(V) dV = 4\pi A_q \int_0^{+\infty} V^4 \left[1 - (q-1) \frac{MV^2}{2k_B T} \right]^{\frac{1}{q-1}} dV. \quad (1.80)$$

Usando novamente as Equações (1.67), (1.69) e (1.72) chega-se ao seguinte resultado:

$$\langle V^2 \rangle_q = \frac{6k_B T}{(5q-3)M}, \quad (1.81)$$

o que leva ao resultado abaixo para a raiz quadrada da velocidade quadrática média:

$$V_{rms} = \sqrt{\frac{6k_B T}{(5q-3)M}}. \quad (1.82)$$

Tomando-se o limite $q \rightarrow 1$, onde a deformação introduzida pelo parâmetro q é removida, mostra-se facilmente que os resultados dados pelas Equações (1.75), (1.79) e (1.82) reproduzem, respectivamente, os resultados dados pelas Equações (1.37), (1.40) e (1.43). Na Figura 1.6 vemos o comportamento da densidade de probabilidades do módulo das velocidades para um sistema governado pela teoria de Tsallis, considerando o ^{132}Xe com temperatura de 900 K . É notória a semelhança com o gráfico apresentado na Figura 1.4, onde é apresentada a distribuição de Maxwell-Boltzmann para o mesmo isótopo, com diversas temperaturas. Esta semelhança indica a possibilidade de se pensar em uma temperatura efetiva, possibilitando um mapeamento da teoria q -deformada na teoria de Maxwell-Boltzmann.

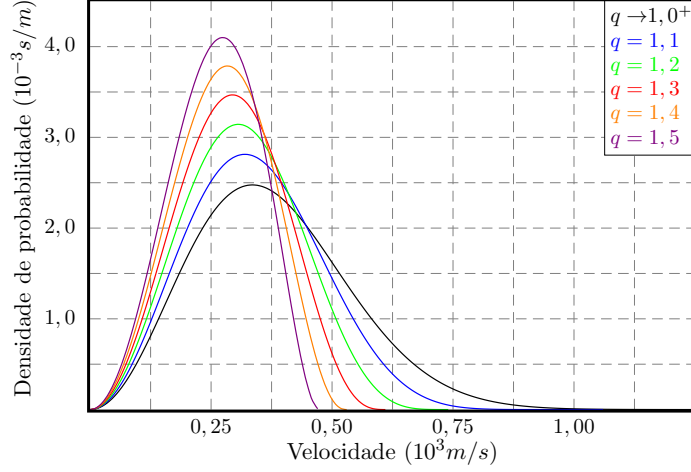


Figura 1.6: Distribuição de velocidades de Tsallis para o ^{132}Xe para $T = 900\text{ K}$ considerando alguns valores de q .

1.4.2 Limites das expressões para $q \rightarrow 1$

Nesta subseção são verificados os limites quando é tomado o limite $q \rightarrow 1$, que remove a deformação introduzida pelo parâmetro q , para as funções \exp_q e \ln_q , assim como para a distribuição de velocidades de Tsallis. Para a função \exp_q , se tem o seguinte:

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow 1} \exp_q(z) &= \lim_{q \rightarrow 1} [1 + (1 - q)z]^{\frac{1}{1-q}} = \\ &= \lim_{q \rightarrow 1} \exp \left\{ \ln [1 + (1 - q)z]^{\frac{1}{1-q}} \right\} = \exp(L). \end{aligned} \quad (1.83)$$

O valor de L é determinado com o uso da regra de L'Hôpital [48, 49]:

$$\begin{aligned} L_1 &= \lim_{q \rightarrow 1} \left\{ \frac{1}{1-q} \ln [1 + (1-q)z] \right\} = \frac{\lim_{q \rightarrow 1} \left\{ \frac{d}{dq} \ln [1 + (1-q)z] \right\}}{\lim_{q \rightarrow 1} \frac{d}{dq} (1-q)} = \\ &= \lim_{q \rightarrow 1} \left\{ -\frac{\frac{d}{dq} [1 + (1-q)z]}{[1 + (1-q)z]} \right\} = \lim_{q \rightarrow 1} \left[-\frac{-z}{1 + (1-q)z} \right] = z, \end{aligned} \quad (1.84)$$

que leva, finalmente, ao resultado abaixo:

$$\lim_{q \rightarrow 1} \exp_q(z) = \exp(z). \quad (1.85)$$

Já para a função q -logarítmica, faz-se uso direto da regra de L'Hôpital:

$$\begin{aligned}
\lim_{q \rightarrow 1} \ln_q(z) &= \lim_{q \rightarrow 1} \left(\frac{z^{1-q} - 1}{1 - q} \right) = \lim_{q \rightarrow 1} \left[\frac{\frac{d}{dq}(z^{1-q} - 1)}{\frac{d}{dq}(1 - q)} \right] = \\
&= - \lim_{q \rightarrow 1} \frac{d}{dq} \exp[\ln(z^{1-q})] = - \lim_{q \rightarrow 1} \frac{d}{dq} \exp[(1 - q) \ln(z)] = \\
&= \ln(z) \lim_{q \rightarrow 1} \exp[(1 - q) \ln(z)] = \ln(z), \tag{1.86}
\end{aligned}$$

ou seja, tem-se o resultado esperado:

$$\lim_{q \rightarrow 1} \ln_q(z) = \ln(z). \tag{1.87}$$

Para o cálculo do limite de A_q , faz-se uso do comportamento assintótico das funções gama [50]:

$$\Gamma(x) \sim \sqrt{2\pi x} x^{x-1/2} e^{-x}, \quad x \rightarrow +\infty. \tag{1.88}$$

Deste modo, pode-se avaliar o comportamento assintótico da razão entre as funções gama envolvidas:

$$\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{q-1}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \sim e^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{q-1}{2} + 1\right)^{\frac{1}{q-1}} (q-1)^{-\frac{1}{2}}, \quad q \rightarrow 1. \tag{1.89}$$

Prossegue-se então no cálculo do limite,

$$\begin{aligned}
\lim_{q \rightarrow 1} A_q &= \lim_{q \rightarrow 1} \left[\left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \frac{(3q-1)(1+q)}{2} (q-1)^{1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{q-1}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} \right] = \\
&= e^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \lim_{q \rightarrow 1^+} \left[\frac{(3q-1)(1+q)}{2} \right] \lim_{q \rightarrow 1} \left(\frac{q-1}{2} + 1 \right)^{\frac{1}{q-1}} = \\
&= e^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \lim_{u \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2u} + 1 \right)^u = \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2}, \tag{1.90}
\end{aligned}$$

onde se fez, como passo intermediário, a substituição $u = 1/(q-1)$ e também utilizou-se o seguinte limite fundamental [48, 49]:

$$\lim_{u \rightarrow +\infty} \left(1 + \frac{a}{u} \right)^u = e^a. \tag{1.91}$$

Deste modo, tem-se finalmente que:

$$\lim_{q \rightarrow 1} A_q = \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2}. \tag{1.92}$$

Tendo estabelecido o limite de A_q , procede-se no cálculo do limite da função

\exp_{2-q} :

$$\begin{aligned}\lim_{q \rightarrow 1^+} \exp_{2-q}(x) &= \lim_{q \rightarrow 1^+} [1 + (q-1)x]^{\frac{1}{q-1}} = \\ &= \lim_{q \rightarrow 1^+} \exp \left\{ \ln [1 + (q-1)x]^{\frac{1}{q-1}} \right\} = \exp(L).\end{aligned}\quad (1.93)$$

O valor de L é determinado com o uso da regra de L'Hôpital [48, 49]:

$$\begin{aligned}L &= \lim_{q \rightarrow 1^+} \left\{ \frac{1}{q-1} \ln [1 + (q-1)x] \right\} = \frac{\lim_{q \rightarrow 1^+} \left\{ \frac{d}{dq} \ln [1 + (q-1)x] \right\}}{\lim_{q \rightarrow 1} \frac{d}{dq} (q-1)} = \\ &= \lim_{q \rightarrow 1^+} \left\{ \frac{\frac{d}{dq} [1 + (q-1)x]}{[1 + (q-1)x]} \right\} = \lim_{q \rightarrow 1^+} \left[\frac{x}{1 + (q-1)x} \right] = x,\end{aligned}\quad (1.94)$$

que leva, finalmente, ao seguinte resultado:

$$\lim_{q \rightarrow 1} \exp_{2-q}(x) = \exp(x). \quad (1.95)$$

Com posse dos resultados obtidos nas Equações (1.92) e (1.95), fica evidenciado que no limite $q \rightarrow 1$, a distribuição de Tsallis reproduz a distribuição de Maxwell-Boltzmann, dada pela Equação (1.31):

$$\lim_{q \rightarrow 1} F_q(V) = \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{MV^2}{2k_B T}}. \quad (1.96)$$

1.5 A distribuição de Kaniadakis

É sabido que a descrição estatística ou termodinâmica de sistemas não extensivos necessitam de uma generalização da termoestatística usual de Maxwell-Boltzmann [51–53]. Alguns exemplos de sistemas físicos ou processos onde a aproximação padrão se mostra inadequada podem ser encontrados em astrofísica estelar [54–56], física de plasma [57, 58], gravitação, fractais, espectro de raios cósmicos [59], estatísticas de terremotos [60] dentre outras aplicações.

Nesta seção, uma estatística não gaussiana, ou mais apropriadamente, quase maxwelliana, é considerada. Trata-se de uma estatística proposta por Giorgio Kaniadakis em 2001 [34], conhecida como distribuição de Kaniadakis, ou distribuição κ , que é baseada numa generalização do teorema-H de Boltzmann, sendo dependente de um parâmetro κ que mensura o desvio do comportamento gaussiano das partículas do sistema a ser estudado.



Figura 1.7: Giorgio Kaniadakis (1957 -).³

1.5.1 Expressões matemáticas e propriedades

Formalmente, a distribuição κ é escrita como:

$$F_{\kappa}(V) = A_{\kappa} \exp_{\kappa} \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right), \quad (1.97)$$

onde a constante A_{κ} deve ser determinada a partir de uma condição de normalização, e a função κ -exponencial é definida por:

$$\exp_{\kappa}(x) = \left(\sqrt{1 + \kappa^2 x^2} + \kappa x \right)^{1/\kappa}. \quad (1.98)$$

Levando em consideração a isotropia das velocidades, pode-se escrever:

$$F_{\kappa}(V) d^3V = F_{\kappa}(V) 4\pi V^2 dV = F_{\kappa 0}(V) dV, \quad (1.99)$$

sendo a densidade de probabilidade dos módulos das velocidades dada por:

$$F_{\kappa 0}(V) = 4\pi A_{\kappa} V^2 \exp_{\kappa} \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right), \quad (1.100)$$

e a constante de normalização A_{κ} determinada pela condição:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F_{\kappa 0}(V) dV = 1. \quad (1.101)$$

³Imagem extraída de <https://researchoutreach.org/wp-content/uploads/2018/12/Giorgio-and-Dionisis.pdf> Acesso em 16 de abr de 2019.

Substituindo a Equação (1.100) na (1.101), se tem o seguinte:

$$4\pi A_\kappa \int_0^{+\infty} V^2 \exp_\kappa \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) dV = 1, \quad (1.102)$$

e fazendo uma substituição simples do tipo:

$$u = \frac{MV^2}{2k_B T} \Rightarrow du = \frac{MV}{k_B T} dV, \quad (1.103)$$

chega-se ao resultado abaixo:

$$2\pi A_\kappa \left(\frac{2k_B T}{M} \right)^{3/2} \int_0^{+\infty} u^{1/2} \exp_\kappa(-u) du = 1. \quad (1.104)$$

Usando o resultado [61]:

$$\int_0^{+\infty} u^{r-1} \exp_\kappa(-u) du = \frac{|2\kappa|^{-r}}{(1+|\kappa|r)} \frac{\Gamma(1/2|\kappa| - r/2)}{\Gamma(1/2|\kappa| + r/2)} \Gamma(r), \quad (0 < r < 1/|\kappa|), \quad (1.105)$$

chega-se, finalmente, à seguinte constante de normalização:

$$A_\kappa = \left(\frac{|\kappa|M}{\pi k_B T} \right)^{3/2} \left(1 + \frac{3}{2}|\kappa| \right) \frac{\Gamma(1/2|\kappa| + 3/4)}{\Gamma(1/2|\kappa| - 3/4)}, \quad (1.106)$$

onde o parâmetro κ é tal que $|\kappa| < 2/3$.

Para encontrar a velocidade mais provável, precisa-se da derivada da densidade de probabilidade do módulo das velocidades, dada pela Equação (1.100). Aplicando a regra do produto, se tem que:

$$\begin{aligned} \frac{dF_{\kappa 0}(V)}{dV} &= 4\pi A_\kappa \left[2V \exp_\kappa \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) \right. \\ &\quad \left. + V^2 \frac{d}{dV} \exp_\kappa \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) \right], \end{aligned} \quad (1.107)$$

usando, então a derivada da função \exp_κ , dada por:

$$\frac{d}{d\alpha} \exp_\kappa(\alpha) = \frac{\exp_\kappa(\alpha)}{\sqrt{\kappa^2 \alpha^2 + 1}}, \quad (1.108)$$

assim como a regra da cadeia, chega-se ao seguinte:

$$\frac{dF_{\kappa 0}(V)}{dV} = 4\pi A_\kappa \left[2V - \frac{MV^3}{k_B T \sqrt{\kappa^2 \left(\frac{MV^2}{2k_B T} \right)^2 + 1}} \right] \exp_\kappa \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right). \quad (1.109)$$

Na Equação (1.109), usa-se a seguinte condição, que define a velocidade mais provável:

$$\left. \frac{dF_{\kappa 0}(V)}{dV} \right|_{V_{\kappa mp}} = 0, \quad (1.110)$$

o que impõe que o termo entre parênteses na Equação (1.109) deve ser nulo, assim:

$$2V_{\kappa mp} \sqrt{\kappa^2 \left(\frac{MV_{\kappa mp}^2}{2k_B T} \right)^2 + 1} - \frac{MV_{\kappa mp}^3}{k_B T} = 0, \quad (1.111)$$

A Equação (1.111) admite $V_{\kappa mp} = 0$ como solução, que obviamente não é o resultado procurado. Descartando esta solução, resta resolver a equação abaixo:

$$\begin{aligned} 2\sqrt{\kappa^2 \left(\frac{MV_{\kappa mp}^2}{2k_B T} \right)^2 + 1} - \frac{MV_{\kappa mp}^3}{k_B T} &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \sqrt{\kappa^2 \left(\frac{MV_{\kappa mp}^2}{2k_B T} \right)^2 + 1} &= \frac{MV_{\kappa mp}^3}{2k_B T}. \end{aligned} \quad (1.112)$$

Elevando ao quadrado o resultado da Equação (1.112), chega-se ao seguinte:

$$\kappa^2 \left(\frac{MV_{\kappa mp}^2}{2k_B T} \right)^2 + 1 = \left(\frac{MV_{\kappa mp}^3}{2k_B T} \right)^2 \Rightarrow V_{\kappa mp} = \pm \sqrt{\frac{2k_B T}{M\sqrt{1-\kappa^2}}}, \quad (1.113)$$

como o resultado não pode ser negativo, se tem o resultado abaixo:

$$V_{\kappa mp} = \sqrt{\frac{2k_B T}{M\sqrt{1-\kappa^2}}}. \quad (1.114)$$

A velocidade média é dada por:

$$\langle V \rangle_{\kappa} = \int_0^{+\infty} V F_{\kappa 0}(V) dV = 4\pi A_{\kappa} \int_0^{+\infty} V^3 \exp_{\kappa} \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) dV. \quad (1.115)$$

Fazendo novamente a substituição definida na Equação (1.103), pode-se escrever:

$$\langle V \rangle_{\kappa} = 8\pi A_{\kappa} \left(\frac{k_B T}{M} \right)^2 \int_0^{+\infty} u \exp_{\kappa}(-u) du. \quad (1.116)$$

Utilizando a Equação (1.105), se tem o seguinte:

$$\begin{aligned} \langle V \rangle_{\kappa} &= \frac{8\pi A_{\kappa}}{(1-4\kappa^2)} \left(\frac{k_B T}{M} \right)^2, \\ (|\kappa| < 1/2), \end{aligned} \quad (1.117)$$

que após a substituição da Equação (1.106) e um pouco de manipulação algébrica

leva a:

$$\langle V \rangle_\kappa = \left(\frac{2\sqrt{2}|\kappa|^{3/2}}{1-4\kappa^2} \right) \left(1 + \frac{3|\kappa|}{2} \right) \left[\frac{\Gamma(1/2|\kappa| + 3/4)}{\Gamma(1/2|\kappa| - 3/4)} \right] \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi M}},$$

$$(|\kappa| < 1/2), \quad (1.118)$$

onde a condição $|\kappa| < 1/2$ é imposta pela restrição de validade da Equação (1.105).

Por fim, a velocidade média quadrática é dada por:

$$\langle V^2 \rangle_\kappa = \int_0^{+\infty} V^2 F_{\kappa 0}(V) dV = 4\pi A_\kappa \int_0^{+\infty} V^4 \exp_\kappa \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) dV. \quad (1.119)$$

Usando novamente as Equações (1.103), (1.105) e (1.106) chega-se ao resultado abaixo:

$$\langle V^2 \rangle_\kappa = \frac{2(4|\kappa|)^3(2+3|\kappa|)}{(4-|\kappa|^2)(4-25|\kappa|^2)(2-3|\kappa|)} \left[\frac{\Gamma(1/2|\kappa| + 3/4)}{\Gamma(1/2|\kappa| - 3/4)} \right]^2 \left(\frac{3k_B T}{M} \right),$$

$$(|\kappa| < 2/5), \quad (1.120)$$

o que leva ao seguinte resultado para a raiz quadrada da velocidade quadrática média:

$$V_{\kappa rms} = \sqrt{\frac{2(4|\kappa|)^3(2+3|\kappa|)}{(4-|\kappa|^2)(4-25|\kappa|^2)(2-3|\kappa|)}} \left[\frac{\Gamma(1/2|\kappa| + 3/4)}{\Gamma(1/2|\kappa| - 3/4)} \right] \sqrt{\frac{3k_B T}{M}},$$

$$(|\kappa| < 2/5), \quad (1.121)$$

onde analogamente ao caso da Equação (1.118), a condição $|\kappa| < 2/5$ é imposta ao se utilizar a Equação (1.105).

Tomando-se o limite $\kappa \rightarrow 0$, onde a deformação introduzida pelo parâmetro κ é removida, mostra-se facilmente que os resultados dados pelas Equações (1.114), (1.118) e (1.121) reproduzem, respectivamente, os resultados dados pelas Equações (1.37), (1.40) e (1.43). Na Figura 1.8 vemos o comportamento da densidade de probabilidades do módulo das velocidades para um sistema governado pela teoria de Kaniadakis, considerando o ^{132}Xe com temperatura de 900 K. Assim como no gráfico análogo para a teoria de Tsallis, apresentado na Figura 1.6, percebe-se a semelhança com o gráfico apresentado na Figura (1.4), onde é apresentada a distribuição de Maxwell-Boltzmann para o mesmo isótopo, com diversas temperaturas. Esta semelhança indica novamente a possibilidade de se pensar em uma temperatura efetiva, possibilitando um mapeamento da teoria κ -deformada na teoria de Maxwell-Boltzmann.

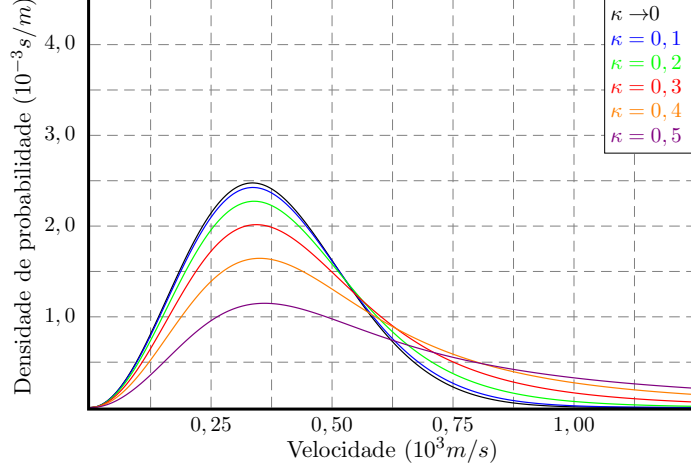


Figura 1.8: Distribuição de velocidades de Kaniadakis para o ^{132}Xe para $T = 900\text{ K}$ considerando alguns valores de κ .

1.5.2 Limites das expressões para $\kappa \rightarrow 0$

Nesta subseção são verificados os limites quando é tomado o limite $\kappa \rightarrow 0$, que remove a deformação introduzida pelo parâmetro κ , para a distribuição de velocidades de Kaniadakis. O limite $\kappa \rightarrow 0$ nas funções gama que aparecem na Equação (1.106) faz com que o argumento de ambas tenda a infinito, o que permite a utilização do comportamento assintótico das funções gama, apresentado na Equação (1.88). Assim:

$$\frac{\Gamma(1/2|\kappa| + n/4)}{\Gamma(1/2|\kappa| - n/4)} \sim e^{-n/2} \frac{(1/2|\kappa| + n/4)^{1/2|\kappa| + n/4 - 1/2}}{(1/2|\kappa| - n/4)^{1/2|\kappa| - n/4 - 1/2}}, \quad \kappa \rightarrow 0. \quad (1.122)$$

Para uma notação mais compacta, fazem-se as definições abaixo:

$$z = 1/2|\kappa|, \quad (1.123)$$

$$\alpha = n/4. \quad (1.124)$$

Permitindo escrever o limite de A_κ , dado pela Equação (1.106), do seguinte modo:

$$\begin{aligned} \lim_{\kappa \rightarrow 0} A_\kappa &= \lim_{z \rightarrow +\infty} A_z = \\ &= \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{2\alpha} e^{-2\alpha} \lim_{z \rightarrow +\infty} \left(\frac{1}{z} \right)^{2\alpha} \left(1 + \frac{\alpha}{z} \right) \frac{(z + \alpha)^{z + \alpha - 1/2}}{(z - \alpha)^{z - \alpha - 1/2}}. \end{aligned} \quad (1.125)$$

Após um rearranjo dos termos, o limite fica:

$$\begin{aligned}\lim_{\kappa \rightarrow 0} A_\kappa &= \lim_{z \rightarrow +\infty} A_z = \\ &= \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{2\alpha} e^{-2\alpha} \lim_{z \rightarrow +\infty} \left(\frac{z + \alpha}{z - \alpha} \right)^z \left(1 + \frac{\alpha}{z} \right)^{\alpha+1/2} \left(1 - \frac{\alpha}{z} \right)^{\alpha+1/2},\end{aligned}\quad (1.126)$$

ou ainda, com propriedades de limite [48, 49]:

$$\begin{aligned}\lim_{\kappa \rightarrow 0} A_\kappa &= \lim_{z \rightarrow +\infty} A_z = \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{2\alpha} e^{-2\alpha} \times \\ &\times \lim_{z \rightarrow +\infty} \left(\frac{z + \alpha}{z - \alpha} \right)^z \lim_{z \rightarrow +\infty} \left(1 + \frac{\alpha}{z} \right)^{\alpha+1/2} \lim_{z \rightarrow +\infty} \left(1 - \frac{\alpha}{z} \right)^{\alpha+1/2}.\end{aligned}\quad (1.127)$$

Os dois últimos limites na Equação (1.127) são diretos e valem 1. Para o limite restante, tem-se que:

$$\begin{aligned}\lim_{z \rightarrow +\infty} \left(\frac{z + \alpha}{z - \alpha} \right)^z &= \lim_{z \rightarrow +\infty} \left(1 + \frac{2\alpha}{z - \alpha} \right)^z = \lim_{u \rightarrow +\infty} \left(1 + \frac{2\alpha}{u} \right)^{u+\alpha} \\ &= \lim_{u \rightarrow +\infty} \left(1 + \frac{2\alpha}{u} \right)^u \lim_{u \rightarrow +\infty} \left(1 + \frac{2\alpha}{u} \right)^\alpha = e^{2\alpha}.\end{aligned}\quad (1.128)$$

Pode-se notar que, como passo intermediário, se fez a substituição $u = z - \alpha$ e também utilizou-se o limite fundamental apresentado na Equação (1.91). Deste modo, tem-se finalmente que:

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} A_\kappa = \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2}.\quad (1.129)$$

Tendo estabelecido o limite de A_κ , procede-se no cálculo do limite da função $\exp_\kappa(x)$:

$$\begin{aligned}\lim_{\kappa \rightarrow 0} \exp_\kappa(x) &= \lim_{\kappa \rightarrow 0} \exp[\ln \exp_\kappa(x)] = \\ &= \lim_{\kappa \rightarrow 0} \exp \left[\ln \left(\sqrt{1 + \kappa^2 x^2} + \kappa x \right)^{\frac{1}{\kappa}} \right].\end{aligned}\quad (1.130)$$

Usando-se propriedades da função logarítmica, e também o fato da função exponencial ser contínua em todo o seu domínio, se tem o seguinte [48, 49]:

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} \exp_\kappa(x) = \exp \left\{ \lim_{\kappa \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\kappa} \ln \left(\sqrt{1 + \kappa^2 x^2} + \kappa x \right) \right] \right\} = \exp(L).\quad (1.131)$$

O valor de L é determinado facilmente pelo uso da regra de L'Hôpital [48, 49]:

$$\begin{aligned} L &= \lim_{\kappa \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\kappa} \ln \left(\sqrt{1 + \kappa^2 x^2} + \kappa x \right) \right] = \frac{\lim_{\kappa \rightarrow 0} \left[\frac{d}{d\kappa} \ln \left(\sqrt{1 + \kappa^2 x^2} + \kappa x \right) \right]}{\lim_{\kappa \rightarrow 0} \left(\frac{d}{d\kappa} \kappa \right)} = \\ &= \lim_{\kappa \rightarrow 0} \left(\frac{\kappa x^2 (1 + \kappa^2 x^2)^{-1/2} + x}{\sqrt{1 + \kappa^2 x^2} + \kappa x} \right) = x, \end{aligned} \quad (1.132)$$

o que leva, finalmente, ao resultado abaixo:

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} \exp_{\kappa}(x) = \exp(x) = e^x. \quad (1.133)$$

Com posse dos resultados apresentados nas Equações (1.129) e (1.133), o limite da distribuição de Kaniadakis representada na Equação (1.97) torna-se trivial:

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} F_{\kappa}(V) = \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{MV^2}{2k_B T}}, \quad (1.134)$$

que é justamente a expressão conhecida para a distribuição de Maxwell-Boltzmann.

Capítulo 2

O Fenômeno de Alargamento Doppler



Reator de Pesquisa RA-6, localizado em San Carlos de Bariloche, Argentina, nas instalações do *Centro Atômico Bariloche* (CAB), vinculado à *Comisión Nacional de Energía Atómica* (CNEA).

Nos reatores nucleares, alguns nêutrons podem ser absorvidos na região de ressonâncias, e no projeto de tais reatores, um tratamento acurado da captura de ressonância é essencial. O Fenômeno de Alargamento Doppler é adequadamente representado matematicamente na seção de choque microscópica da interação nêutron-núcleo através da Função de Alargamento Doppler, também conhecida como Primeira Função de Voigt. Fisicamente, esta função descreve o fenômeno de alargamento de ressonâncias resolvidas em função da temperatura, o que causa um aumento na faixa de energias onde é mais provável que um nêutron seja capturado. Matematicamente, $\psi(x, \xi)$ pode ser interpretada como uma integral de convolução entre uma função gaussiana e uma lorentziana. Outra função igualmente importante é a Função do Termo de Interferência $\chi(x, \xi)$, ou segunda Função de Voigt, que deve ser considerada no caso do espalhamento no formalismo de Breit-Wigner.

Neste capítulo será apresentada uma dedução detalhada para as duas Funções de Voigt, utilizando a distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann, e serão estudadas as principais propriedades destas duas funções. O detalhamento no decorrer do texto pode parecer um tanto excessivo, mas é importante que seja apresentado desta forma, pois nos capítulos 4 e 5, onde são abordadas as distribuições de velocidades de Tsallis e Kaniadakis, respectivamente, é fundamental que se conheça minuciosamente os detalhes dos cálculos envolvidos na obtenção dos resultados.

2.1 Expressão geral da Função de Alargamento Doppler

Uma expressão detalhada para a distribuição de velocidades dos núcleos alvo de um reator nuclear seria extremamente complexa, ou até mesmo impossível de se determinar, pois esta dependeria dos mais diversos fatores, tais como vibrações atômicas na rede cristalina, movimento atômico em líquidos e diversos outros processos físicos nada triviais. Felizmente, uma aproximação na qual se representa a distribuição de velocidades destes núcleos como obedecendo a distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann, dada pela Equação (1.31), já é o suficiente para muitos propósitos. Neste contexto, a seção de choque média de interação nêutron-núcleo fica definida pela seguinte equação [4–8]:

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{1}{v} \int |\vec{v} - \vec{V}| \sigma(|\vec{v} - \vec{V}|) F(V) d^3V, \quad (2.1)$$

sendo \vec{V} a velocidade do núcleo alvo, \vec{v} a velocidade do nêutron, V e v , respectivamente, seus módulos e $\sigma(|\vec{v} - \vec{V}|)$ a seção de choque.

A velocidade relativa entre nêutron e núcleo é definida como $\vec{v}_r = \vec{v} - \vec{V}$. Fazendo

$v_r = |\vec{v}_r|$, e considerando uma distribuição isotrópica de velocidades, tem-se que:

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{1}{v} \int_0^{+\infty} \int_{4\pi} V^2 F(V) v_r \sigma(v_r) d\hat{\Omega} dV. \quad (2.2)$$

Após abrir a integral no ângulo sólido e realizar a integração no ângulo azimutal ϕ , chega-se ao resultado:

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{2\pi}{v} \int_0^{+\infty} \int_0^\pi V^2 F(V) v_r \sigma(v_r) \sin\theta d\theta dV, \quad (2.3)$$

onde θ é o ângulo entre \vec{v} e \vec{V} . Faz-se agora uma mudança na variável de integração de θ para v_r e, para tal, usa-se a lei dos cossenos, proveniente da relação existente entre v_r e V ,

$$v_r^2 = v^2 + V^2 - 2Vv \cos\theta, \quad (2.4)$$

para se obter o seguinte:

$$\sin\theta d\theta = \frac{v_r}{Vv} dv_r. \quad (2.5)$$

Com essa mudança na variável de integração, a Equação (2.3) assume a forma:

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{2\pi}{v^2} \int_0^{+\infty} \int_{|v-V|}^{v+V} V F(V) v_r^2 \sigma(v_r) dv_r dV. \quad (2.6)$$

Levando em conta o módulo que aparece no intervalo de integração para a variável v_r na Equação (2.6), faz-se necessário separar tal equação em duas integrais, como segue:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}(v, T) = \frac{2\pi}{v^2} & \left[\int_0^v \int_{v-V}^{v+V} V F(V) v_r^2 \sigma(v_r) dv_r dV + \right. \\ & \left. + \int_v^{+\infty} \int_{-v+V}^{v+V} V F(V) v_r^2 \sigma(v_r) dv_r dV \right], \end{aligned} \quad (2.7)$$

sendo a primeira integral correspondente à região onde $V < v$ e a segunda à região onde $V > v$. Procede-se, então, com uma mudança na ordem de integração, como sugerido em [62]. A região de integração \mathcal{R}_1 da primeira integral dupla que aparece na Equação (2.7) é limitada no plano $V \times v_r$ inferiormente pela reta $v_r = v - V$ e superiormente pela reta $v_r = v + V$, com $0 \leq V \leq v$. Já a região de integração \mathcal{R}_2 da segunda integral dupla é limitada inferiormente por $v_r = -v + V$ e superiormente por $v_r = v + V$, com $v \leq V$. Essas regiões estão representadas na Figura 2.1, para o caso de se fazer primeiro a integração na variável v_r .

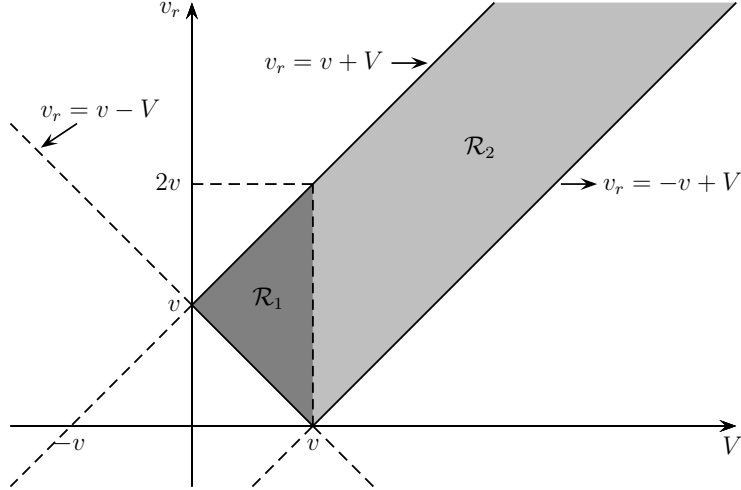


Figura 2.1: Região de integração começando pela variável v_r .

Ao fazer a mudança da ordem de integração, tem-se novamente duas integrais duplas, sendo a primeira delas na região \mathcal{R}_3 limitada à direita pela reta $V = v + v_r$ e à esquerda pela reta $V = v - v_r$ com $0 \leq v_r \leq v$, e a segunda na região \mathcal{R}_4 , limitada à direita pela reta $V = v + v_r$ e à esquerda pela reta $V = -v + v_r$ com $v_r \geq v$. Estas regiões estão ilustradas na Figura 2.2.

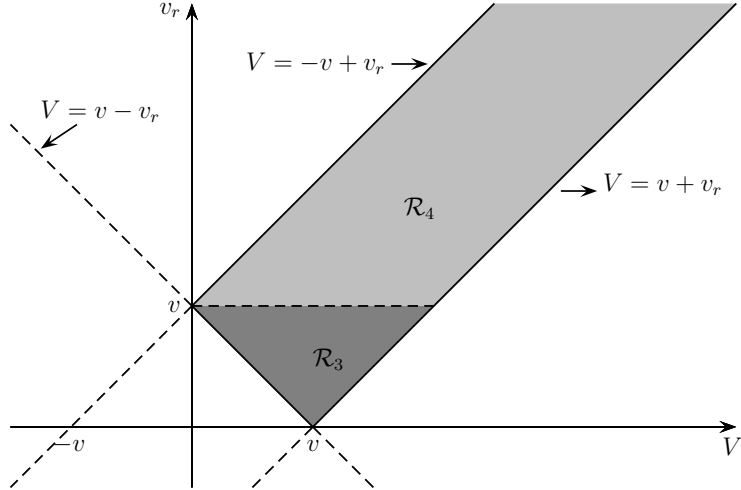


Figura 2.2: Região de integração começando pela variável V .

Com a troca na ordem de integração, a Equação (2.7) fica:

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{2\pi}{v^2} \left[\int_0^v \int_{v-v_r}^{v+v_r} VF(V)v_r^2\sigma(v_r)dVdv_r + \int_v^{+\infty} \int_{-v+v_r}^{v+v_r} VF(V)v_r^2\sigma(v_r)dVdv_r \right]. \quad (2.8)$$

Está se trabalhando com uma distribuição isotrópica de velocidades, propriedade esta que já foi utilizada, inclusive, na obtenção da Equação (2.2). Utilizando a paridade de $F(V)$ dada pela Equação (1.31), tem-se a seguinte propriedade satisfeita:

$$\int_{-a}^b VF(V)dV = \int_a^b VF(V)dV, \quad (2.9)$$

o que permite escrever a Equação (2.8) como:

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{2\pi}{v^2} \int_0^{+\infty} \int_{v-v_r}^{v+v_r} VF(V)v_r^2\sigma(v_r)dVdv_r. \quad (2.10)$$

No caso de energias próximas à de ressonância, é possível descrever a dependência energética da seção de choque de captura por uma fórmula simples, válida para $T = 0\text{ K}$, conhecida como *fórmula nível único de Breit-Wigner* (SLBW) de captura ressonante [1], que expressa em função da energia do centro de massa, assume a forma abaixo [6]:

$$\sigma_\gamma(E_{\text{CM}}) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \left(\frac{E_{0\text{CM}}}{E_{\text{CM}}} \right)^{1/2} \left[\frac{1}{1 + \frac{4}{\Gamma^2}(E_{\text{CM}} - E_{0\text{CM}})^2} \right]. \quad (2.11)$$

Nessa expressão, E_{CM} é a energia no sistema nêutron núcleo alvo no referencial do centro de massa, $E_{0\text{CM}}$ é a energia onde ocorre o pico de ressonância, também no referencial do centro de massa, Γ é a chamada *largura total* da ressonância, Γ_γ é a *largura da linha radioativa*, que caracteriza a probabilidade de que o núcleo composto decaia via emissão gama e σ_0 é o valor da seção de choque total, $\sigma_\gamma(E_{\text{CM}})$, na energia de ressonância $E_{0\text{CM}}$. Nota-se que na Equação (2.10) precisa-se de $\sigma(v_r)$, ao passo que na Equação (2.11) têm-se $\sigma(E_{\text{CM}})$. Resolve-se esse problema sem maiores dificuldades com uma mudança na variável de integração de v_r para E_{CM} , baseando-se no fato de que (Apêndice A):

$$E_{\text{CM}} = \frac{1}{2}\mu v_r^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{A}{A+1} \right) m_n v_r^2. \quad (2.12)$$

Após a mudança de variável proposta, encontra-se a expressão:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_\gamma(E, T) = & \sqrt{2\pi} \frac{m_n}{\mu^{3/2}} \frac{\sigma_0 \sqrt{E_{0\text{CM}}}}{E} \left(\frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \right) \times \\ & \times \int_0^{+\infty} \frac{1}{1 + \frac{4}{\Gamma^2}(E_{\text{CM}} - E_{0\text{CM}})^2} \int_{v-v_r}^{v+v_r} VF(V)dV dE_{\text{CM}}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

onde foi usado o fato de que a energia do nêutron, no referencial do laboratório, é

dada por:

$$E = \frac{1}{2}m_n v^2, \quad (2.14)$$

sendo m_n a massa do nêutron. O termo que envolve as massas na Equação (2.13) pode ser escrito do seguinte modo:

$$\frac{m_n}{\mu^{3/2}} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sqrt{\frac{(M+m_n)^2}{Mm_n}} \sqrt{\frac{M+m_n}{M}}, \quad (2.15)$$

possibilitando rescrever a Equação (2.13) como:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_\gamma(E, T) = & \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{M}} \sigma_0 \frac{\sqrt{\frac{M+m_n}{M} E_{\text{ocm}}}}{\sqrt{E}} \left(\frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \right) \frac{2\sqrt{k_B T}}{\sqrt{\frac{Mm_n}{(M+m_n)^2} 4k_B T E}} \times \\ & \times \int_0^{+\infty} \frac{1}{1 + \frac{4}{\Gamma^2} (E_{\text{cm}} - E_{\text{ocm}})^2} \int_{v-v_r}^{v+v_r} V F(V) dV dE_{\text{cm}}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

O termo envolvendo E_{ocm} que aparece dentro da raiz quadrada na Equação (2.16) corresponde à energia E_0 , onde ocorre o pico de ressonância no referencial do laboratório (Apêndice A):

$$E_0 = \left(\frac{M+m_n}{M} \right) E_{\text{ocm}}. \quad (2.17)$$

Usando-se, também, a definição do comprimento Doppler da ressonância [63]:

$$\Gamma_D = \sqrt{\frac{Mm_n}{(M+m_n)^2} 4k_B T E} = \sqrt{\frac{A}{(A+1)^2} 4k_B T E}. \quad (2.18)$$

Além disso, a Equação (2.17) indica que, para núcleos massivos, pode-se considerar que:

$$E_{\text{ocm}} \approx E_0, \quad (2.19)$$

assim, fazendo uso da Equação (2.19) para o termo E_{ocm} restante, é possível escrever a Equação (2.16) como:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_\gamma(E, T) = & \frac{2\pi\sqrt{2k_B T}}{\sqrt{M}} \sigma_0 \left(\frac{E_0}{E} \right)^{1/2} \left(\frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma \Gamma_D} \right) \times \\ & \times \int_0^{+\infty} \frac{1}{1 + \frac{4}{\Gamma^2} (E_{\text{cm}} - E_0)^2} \int_{v-v_r}^{v+v_r} V F(V) dV dE_{\text{cm}}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Na Equação (2.18), nota-se que para o caso de núcleos pesados, $M \gg m_n$, com

$M = Am_n$, pode-se fazer a seguinte aproximação:

$$\Gamma_D \approx \sqrt{\frac{4k_B T E}{A}}. \quad (2.21)$$

Levando em consideração que as energias mais importantes são as próximas da energia de ressonância, pode-se ainda aproximar $E \approx E_0$. Assim, tem-se:

$$\Gamma_D \approx \sqrt{\frac{4k_B T E_0}{A}}, \quad (2.22)$$

que é a expressão conhecida para Γ_D .

Faz-se então na Equação (2.20) as substituições abaixo:

$$y = \frac{2}{\Gamma}(E_{\text{CM}} - E_0), \quad (2.23)$$

$$x = \frac{2}{\Gamma}(E - E_0), \quad (2.24)$$

e se obtém o resultado:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_\gamma(E, T) = & \pi \sqrt{\frac{2k_B T}{M}} \sigma_0 \left(\frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \right) \left(\frac{E_0}{E} \right)^{1/2} \left(\frac{\Gamma}{\Gamma_D} \right) \times \\ & \times \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{1}{1+y^2} \int_{v(x)-v_r(y)}^{v(x)+v_r(y)} V F(V) dV dy. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Definindo:

$$\xi = \frac{\Gamma}{\Gamma_D}, \quad (2.26)$$

pode-se escrever a Equação (2.25) na forma:

$$\bar{\sigma}_\gamma(E, T) = \sigma_0 \left(\frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \right) \left(\frac{E_0}{E} \right)^{1/2} \Psi(x, \xi), \quad (2.27)$$

onde define-se a *Função de Alargamento Doppler*:

$$\Psi(x, \xi) = \pi \sqrt{\frac{2k_B T}{M}} \xi \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{1}{1+y^2} \int_{v(x)-v_r(y)}^{v(x)+v_r(y)} V F(V) dV dy. \quad (2.28)$$

A Equação (2.28) é uma forma conveniente de se escrever a Função de Alargamento Doppler $\Psi(x, \xi)$ para o trabalho proposto nesta tese, pois com essa equação, basta substituir a expressão da distribuição que se deseja utilizar para prosseguir com os cálculos e encontrar uma expressão final [64, 65]. Nos capítulos seguintes, esse estudo será realizado para duas distribuições quase-maxwellianas, a saber, a distribuição de Tsallis no capítulo 4 e a de Kaniadakis no capítulo 5. No presente capítulo,

prossegue-se com a determinação da expressão da Função de Alargamento Doppler com distribuição maxwelliana de velocidades. Para tal, substitui-se a Equação (1.31) na Equação (2.28) e faz-se uma substituição simples do tipo $u = -V^2/2v_{th}^2$ para se obter o seguinte resultado:

$$\Psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{1}{1+y^2} \left[e^{-\frac{(v(x)-v_T(y))^2}{2v_{th}^2}} - e^{-\frac{(v(x)+v_T(y))^2}{2v_{th}^2}} \right] dy, \quad (2.29)$$

onde

$$v_{th} = \sqrt{\frac{k_B T}{M}}, \quad (2.30)$$

é a velocidade térmica e também o parâmetro de escala da distribuição.

2.2 Expressão geral da Função do Termo de Interferência

Na seção anterior, foram estudados os efeitos térmicos de movimentos nucleares na captura ressonante. Com intuito de estudar o espalhamento, pode-se considerar uma teoria mais genérica em termos de parâmetros fenomenológicos. Mas, infelizmente, as expressões resultantes são tão complexas que acabam não apresentando muitas aplicações práticas em cálculos usuais envolvendo Física de Reatores. Entretanto, para baixas energias, onde apenas o espalhamento de onda-s pode ocorrer, e dado que as ressonâncias envolvidas sejam resolvidas, estas expressões podem ser drasticamente simplificadas. Neste contexto, existe um termo de espalhamento ressonante, cujo termo pode ser dado pelo formalismo de Breit-Wigner, com forma análoga ao do Equação (2.11). Além disso, próximo a uma ressonância com energia E_0 , o seguinte termo, correspondente à interferência, deve ser adicionado ao formalismo de Breit-Wigner [6]:

$$\sigma_s(E_{CM}) = \sigma_0 \frac{2R}{\lambda_0} \left(\frac{E_0}{E_{CM}} \right)^{1/2} \left[\frac{\frac{2}{\Gamma} (E_{CM} - E_0)}{1 + \frac{4}{\Gamma^2} (E_{CM} - E_0)^2} \right], \quad (2.31)$$

Assim, tem-se a seguinte expressão para a seção de choque de espalhamento:

$$\bar{\sigma}_s(E, T) = \sigma_0 \left(\frac{\Gamma_n}{\Gamma} \right) \left(\frac{E_0}{E} \right)^{1/2} \Psi(x, \xi) + \frac{\sigma_0 R}{\lambda_0} \left(\frac{E_0}{E} \right)^{1/2} X(x, \xi) + 4\pi R^2. \quad (2.32)$$

O primeiro termo da Equação (2.32) contém a Função de Alargamento Doppler $\Psi(x, \xi)$, definida na Equação (2.28), o segundo termo a *Função do Termo de Interferência* $X(x, \xi)$ e o terceiro corresponde ao termo de espalhamento potencial. Para obter uma expressão para a Função do Termo de Interferência $X(x, \xi)$, deve-se

substituir a Equação (2.31) na Equação (2.10). Assim, após realizar a mudança na variável de integração proposta na Equação (2.12), chega-se à seguinte expressão:

$$X(x, \xi) = \left(\frac{E}{E_0} \right)^{1/2} \frac{2\sqrt{2}\pi}{E} \frac{m_n}{\mu^{3/2}} \sqrt{E_0} \times \\ \times \int_0^{+\infty} \frac{\frac{\Gamma}{2}(E_{\text{CM}} - E_0)}{1 + \frac{\Gamma^2}{4}(E_{\text{CM}} - E_0)^2} \int_{v-v_r}^{v+v_r} V F(V) dV dE_{\text{CM}}. \quad (2.33)$$

Usando as Equações (2.15) e (2.23), e considerando núcleos alvo massivos, se chega ao resultado abaixo:

$$X(x, \xi) = \left(\frac{E}{E_0} \right)^{1/2} \frac{2\sqrt{2}\pi}{E\sqrt{M}} \frac{2\sqrt{k_B T E}}{\sqrt{4k_B T E}} \sqrt{E_0} \frac{\Gamma}{2} \times \\ \times \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{y}{1 + y^2} \int_{v(x)-v_r(y)}^{v(x)+v_r(y)} V F(V) dV dy. \quad (2.34)$$

Utilizando as Equações (2.17), (2.18) e (2.26), se tem que:

$$X(x, \xi) = 2\pi \sqrt{\frac{2k_B T}{M}} \xi \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{y}{1 + y^2} \int_{v(x)-v_r(y)}^{v(x)+v_r(y)} V F(V) dV dy. \quad (2.35)$$

Assim como a Equação (2.28) para $\Psi(x, \xi)$, a Equação (2.35) é uma forma conveniente para se escrever a Função do Termo de Interferência $X(x, \xi)$ para o trabalho proposto nesta tese. Com procedimento análogo ao utilizado para se obter a Equação (2.29), ao se considerar a distribuição de Maxwell-Boltzmann, se encontra o seguinte:

$$X(x, \xi) = \frac{\xi}{\sqrt{\pi}} \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{y}{1 + y^2} \left[e^{-\frac{(v(x)-v_r(y))^2}{2v_{th}^2}} - e^{-\frac{(v(x)+v_r(y))^2}{2v_{th}^2}} \right] dy. \quad (2.36)$$

2.3 As aproximações de Bethe e Placzek

A Função de Alargamento Doppler, escrita na forma dada pela Equação (2.29), assim como o termo de interferência dado pela Equação (2.36), além de não possuírem solução analítica, apresentam formas extremamente complicadas. Deste modo, a possibilidade de se fazer algumas aproximações pode ser muito útil. Para lidar com este tipo de problema, Bethe e Placzek, em seu artigo de 1937 [26], tratam de efeitos de ressonância em processos nucleares e, particularmente, para o caso da Função de Alargamento Doppler, sugerem algumas aproximações para energias próximas ao pico de ressonância. Essas aproximações são as seguintes:

1. Despreza-se a segunda exponencial que aparece nas Equações (2.29) e (2.36),

ou seja, considera-se que:

$$[v(x) + v_r(y)]^2 \gg [v(x) - v_r(y)]^2; \quad (2.37)$$

2. Baseado no fato da razão entre a energia onde ocorre o pico de ressonância e a largura da mesma ser grande, estende-se o limite de integração inferior:

$$-\frac{2E_0}{\Gamma} \rightarrow -\infty; \quad (2.38)$$

3. Usando o fato dos núcleos alvo serem massivos, chega-se à seguinte aproximação:

$$\sqrt{E_{\text{CM}}} = \sqrt{E} \left(1 + \frac{E_{\text{CM}} - E}{E} \right)^{1/2} \approx \sqrt{E} \left(1 + \frac{E_{\text{CM}} - E}{2E} \right). \quad (2.39)$$

Com as duas primeiras aproximações, as Equações (2.29) e (2.36) assumem, respectivamente, as seguintes formas:

$$\Psi(x, \xi) \approx \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1+y^2} e^{-\frac{(v(x)-v_r(y))^2}{2v_{th}^2}} dy, \quad (2.40)$$

$$X(x, \xi) \approx \frac{\xi}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y}{1+y^2} e^{-\frac{(v(x)-v_r(y))^2}{2v_{th}^2}} dy. \quad (2.41)$$

Para implementar a terceira aproximação, é necessário trabalhar um pouco a Equação (2.39):

$$\sqrt{E_{\text{CM}}} \approx \sqrt{E} \left(\frac{E + E_{\text{CM}}}{2E} \right) = \frac{(E + E_{\text{CM}})}{2\sqrt{E}}. \quad (2.42)$$

Usa-se a Equação (2.12), e também o fato de que para $M \gg m_n$ tem-se $\mu \approx m_n$, para se obter:

$$\sqrt{E_{\text{CM}}} = \sqrt{\frac{\mu v_r^2(y)}{2}} \approx \frac{(E + E_{\text{CM}})}{2\sqrt{E}} \Rightarrow v_r(y) \approx \frac{(E + E_{\text{CM}})}{\sqrt{2m_n E}}, \quad (2.43)$$

assim, com auxílio da Equação (2.14), pode-se escrever:

$$v(x) - v_r(y) \approx \sqrt{\frac{2E}{m_n}} - \frac{(E + E_{\text{CM}})}{\sqrt{2m_n E}} = \frac{E - E_{\text{CM}}}{\sqrt{2m_n E}}. \quad (2.44)$$

Usando a Equação (2.44), o argumento da função exponencial que aparece na

Equação (2.40) é escrito como segue:

$$\begin{aligned}
\frac{(v(x) - v_r(y))^2}{2v_{th}^2} &\approx \frac{M}{2k_B T} \frac{[E - E_{CM}]^2}{2m_n E} = \\
&= \frac{M/m_n}{4Ek_B T} [(E - E_0) - (E_{CM} - E_0)]^2 = \\
&= \frac{A}{4Ek_B T} \left[\frac{\Gamma x}{2} - \frac{\Gamma y}{2} \right]^2 = \frac{A\Gamma^2}{4Ek_B T} \frac{(x - y)^2}{4}, \quad (2.45)
\end{aligned}$$

onde foram usadas as Equações (2.23), (2.24) e (2.30). Lançando mão das Equações (2.21) e (2.26), tem-se finalmente que:

$$\frac{(v(x) - v_r(y))^2}{2v_{th}^2} \approx \frac{\xi^2}{4} (x - y)^2, \quad (2.46)$$

o que permite escrever os seguintes resultados para a Função de Alargamento Doppler e para a Função do Termo de Interferência com as aproximações de Bethe e Placzek:

$$\Psi(x, \xi) \approx \psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1 + y^2} e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2} dy, \quad (2.47)$$

$$X(x, \xi) \approx \chi(x, \xi) = \frac{\xi}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y}{1 + y^2} e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2} dy. \quad (2.48)$$

As funções definidas pelas Equações (2.47) e (2.48) também são conhecidas, respectivamente, como primeira e segunda Função de Voigt.

2.4 Propriedades da Função de Alargamento Doppler e da Função do Termo de Interferência

A Função de Alargamento Doppler com as aproximações de Bethe e Placzek, dada pela Equação (2.47), possui as seguintes propriedades:

1. $\psi(x, \xi)$ apresenta apenas valores positivos;
2. $\psi(x, \xi)$ é simétrica em relação ao eixo vertical, ou seja, trata-se de uma função par na variável x ;
3. O alargamento aumenta com o aumento da temperatura, ou seja, à medida que ξ diminui.

A primeira propriedade verifica-se facilmente ao se perceber que na Equação (2.47), a Função de Alargamento Doppler é definida como uma integral imprópria

na variável y , da seguinte função de duas variáveis:

$$f(x, y) = \frac{e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2}}{1 + y^2}, \quad (2.49)$$

e que tal função admite apenas valores positivos, o que implica que $\psi(x, \xi)$ também só possa admitir valores positivos.

A segunda propriedade pode ser verificada fazendo-se uso da expressão matemática dada pela Equação (2.47) para verificar-se a paridade de $\psi(x, \xi)$ na variável x :

$$\psi(\xi, -x) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{\xi^2}{4}(-x-y)^2}}{1 + y^2} dy. \quad (2.50)$$

Na Equação (2.50), se faz a mudança de variáveis definida por $u = -y$, para se obter:

$$\begin{aligned} \psi(\xi, -x) &= \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{+\infty}^{-\infty} \frac{e^{-\frac{\xi^2}{4}(-x+u)^2}}{1 + (-u)^2} (-du) = -\frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{+\infty}^{-\infty} \frac{e^{-\frac{\xi^2}{4}[-(x-u)]^2}}{1 + u^2} du = \\ &= \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-u)^2}}{1 + u^2} du = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2}}{1 + y^2} dy = \\ &= \psi(x, \xi), \end{aligned} \quad (2.51)$$

o que mostra a paridade de $\psi(x, \xi)$ na variável x .

A terceira propriedade também pode ser observada pela análise da Equação (2.47). Esta demonstração é feita em duas etapas: na primeira, mostra-se que a área abaixo da curva dada pela Equação (2.47) não depende da temperatura, ou seja, é independente da variável ξ . Na segunda, mostra-se que quanto maior for o valor de ξ , maior será a altura do pico. A primeira é resolvida simplesmente calculando a área em tela:

$$\begin{aligned} A &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, \xi) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \frac{e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2}}{1 + y^2} dy dx = \\ &= \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-[\frac{\xi}{2}(x-y)]^2}}{1 + y^2} dx dy, \end{aligned} \quad (2.52)$$

onde deve-se reparar que foi realizada uma inversão na ordem de integração.

Usando, na Equação (2.52), a integral da função gaussiana [36]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, a > 0, \quad (2.53)$$

tem-se que:

$$\begin{aligned}
A &= \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \frac{2\sqrt{\pi}}{\xi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \int_{-\alpha}^{+\alpha} \frac{dy}{1+y^2} = \\
&= \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \arctan(y)|_{-\alpha}^{\alpha} = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} [\arctan(\alpha) - \arctan(-\alpha)] = \\
&= \frac{\pi}{2} - \left(-\frac{\pi}{2}\right) = \pi,
\end{aligned} \tag{2.54}$$

o que mostra que a área definida por $\psi(x, \xi)$ não depende da temperatura. Terminada esta primeira parte, precisa-se mostrar que quanto maior o valor de ξ , ou seja, quanto menor a temperatura, maior é a altura do pico, o que pode ser traduzido matematicamente no problema de se mostrar que para $\delta > 0$, então $\psi(\xi + \delta, 0) > \psi(\xi, 0)$. Para tal, basta mostrar que a função definida por

$$\varphi(\xi) = 2\sqrt{\pi}\psi(\xi, 0) = \xi \int_0^{+\infty} \frac{e^{-\xi^2 y^2/4}}{1+y^2} dy \tag{2.55}$$

é estritamente crescente. Assim, faz-se a mudança de variáveis $z = \xi y$, o que permite escrever a função $\varphi(\xi)$ como:

$$\varphi(\xi) = \xi \int_0^{+\infty} \frac{e^{-z^2/4}}{1 + \left(\frac{z}{\xi}\right)^2} \frac{dz}{\xi} = \int_0^{+\infty} \frac{e^{-z^2/4}}{1 + \left(\frac{z}{\xi}\right)^2} dz. \tag{2.56}$$

Para quaisquer valores positivos de z, ξ, δ , tem-se que $\left(\frac{z}{\xi}\right)^2 > \left(\frac{z}{\xi+\delta}\right)^2$, o que leva a:

$$\frac{e^{-z^2/4}}{1 + \left(\frac{z}{\xi}\right)^2} < \frac{e^{-z^2/4}}{1 + \left(\frac{z}{\xi+\delta}\right)^2}, \tag{2.57}$$

e fornece:

$$\varphi(\xi) = \int_0^{+\infty} \frac{e^{-z^2/4}}{1 + \left(\frac{z}{\xi}\right)^2} dz < \int_0^{+\infty} \frac{e^{-z^2/4}}{1 + \left(\frac{z}{\xi+\delta}\right)^2} dz = \varphi(\xi + \delta), \tag{2.58}$$

como se queria mostrar. Assim, pode-se concluir que:

$$\psi(\xi + \delta, 0) > \psi(\xi, 0). \tag{2.59}$$

Com as Equações (2.54) e (2.59), fica demonstrada a terceira propriedade. Na Figura 2.3, vê-se o comportamento da Função de Alargamento Doppler, dada pela Equação (2.47), assim como da Função do Termo de Interferência, dado pela Equação (2.48) para diversos valores da variável ξ . Em tais gráficos, é possível notar as três propriedades acima mencionadas.

Uma referência tradicional da área de Física de Reatores são as tabelas obtidas

em 1963 por Beynon e Grant [35], utilizando expansão em polinômios de Chebyshev [36], assim como o método de Gauss-Hermite [37] para se obter os valores das Funções de Voigt: a Função de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e a Função do Termo de Interferência $\chi(x, \xi)$. Esta tabela apresenta os valores destas funções para diversos valores dos parâmetros x e ξ , e é tão importante que figura nos textos de vários livros didáticos da área de Física de Reatores, tais como o do Lamarsh [4], Duderstadt & Hamilton [6] e Stacey [7].

Na Tabela 2.1, são apresentados os valores calculados, à partir de um código na linguagem *C*, utilizando o método da Quadratura de Gauss-Legendre com 15 pontos [66], para a Função de Alargamento Doppler dada pela Equação (2.47). Dos valores obtidos, apenas 8 deles diferem dos encontrados na tabela disponível em [35] e estes, assim como os desvios percentuais, estão presentes na Tabela 2.2, onde a coluna para $\psi_{BG}(x, \xi)$ representa os valores para a Função de Alargamento Doppler obtidos por Beynon e Grant em 1963, e a coluna para $\psi(x, \xi)$ apresenta os valores calculados utilizando-se o método da quadratura gaussiana aplicado na Equação (2.47). Do mesmo modo, na Tabela 2.3 são apresentados os valores calculados, utilizando-se o mesmo método numérico, para a Função do Termo de Interferência dada pela Equação (2.48), assim como na Tabela 2.4 são apresentados os desvios percentuais em relação aos dados apresentados por Beynon e Grant [35]. Deve se notar que apesar de aparecerem para a Função do Termo de Interferência 14 valores com desvios percentuais não nulos, tais desvios, em média, são uma ordem de grandeza menores que os apresentados na Tabela 2.2.

Analisando as Tabelas 2.2 e 2.4, pode se perceber que o maior desvio percentual entre $\psi_{BG}(x, \xi)$ e $\psi(x, \xi)$ corresponde ao valor de 0,066% obtido para $\xi = 0,40$ e $x = 8$, assim como o maior desvio percentual entre $\chi_{BG}(x, \xi)$ and $\chi(x, \xi)$ corresponde ao valor de 0,00071% obtido para $\xi = 0,05$ e $x = 6$, ou seja, os desvios são todos desprezíveis. As Tabelas 2.1 e 2.3 serão tomadas como referência para esta tese. Logo após as tabelas, os gráficos apresentados na Figura 2.3 ilustram a Função de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e a Função do Termo de Interferência $\chi(x, \xi)$, respectivamente, para diversos valores de ξ .

Tabela 2.1: Valores da Função de Alargamento Doppler usando a Equação (2.47).

Função $\psi(x, \xi)$										
ξ	$x = 0$	$x = 0.5$	$x = 1$	$x = 2$	$x = 4$	$x = 6$	$x = 8$	$x = 10$	$x = 20$	$x = 40$
0,05	0,04309	0,04308	0,04306	0,04298	0,04267	0,04216	0,04145	0,04055	0,03380	0,01639
0,10	0,08384	0,08379	0,08364	0,08305	0,08073	0,07700	0,07208	0,06623	0,03291	0,00262
0,15	0,12239	0,12223	0,12176	0,11989	0,11268	0,10165	0,08805	0,07328	0,01695	0,00080
0,20	0,15889	0,15854	0,15748	0,15331	0,13777	0,11540	0,09027	0,06614	0,00713	0,00070
0,25	0,19347	0,19281	0,19086	0,18325	0,15584	0,11934	0,08277	0,05253	0,00394	0,00067
0,30	0,22624	0,22516	0,22197	0,20968	0,16729	0,11571	0,07043	0,03881	0,00314	0,00065
0,35	0,25731	0,25569	0,25091	0,23271	0,17288	0,10713	0,05726	0,02816	0,00289	0,00064
0,40	0,28679	0,28450	0,27776	0,25245	0,17360	0,09604	0,04569	0,02110	0,00277	0,00064
0,45	0,31477	0,31168	0,30261	0,26909	0,17052	0,08439	0,03670	0,01687	0,00270	0,00064
0,50	0,34135	0,33733	0,32557	0,28286	0,16469	0,07346	0,03025	0,01446	0,00266	0,00063

Tabela 2.2: Desvios percentuais não nulos entre $\psi_{BG}(x, \xi)$ e $\psi(x, \xi)$.

ξ	x	$\psi_{BG}(x, \xi)$	$\psi(x, \xi)$	%
0,25	2	0,18324	0,18325	0,005
0,30	8	0,07042	0,07043	0,014
0,30	10	0,03880	0,03881	0,026
0,35	8	0,05724	0,05726	0,035
0,35	10	0,02815	0,02816	0,036
0,40	4	0,17359	0,17360	0,006
0,40	8	0,04566	0,04569	0,066
0,40	10	0,02109	0,02110	0,047

Tabela 2.3: Valores da Função do Termo de Interferência usando a Equação (2.48).

Função $\chi(x, \xi)$										
ξ	$x = 0$	$x = 0.5$	$x = 1$	$x = 2$	$x = 4$	$x = 6$	$x = 8$	$x = 10$	$x = 20$	$x = 40$
0,05	0,00000	0,00120	0,00239	0,00478	0,00951	0,01414	0,01865	0,02297	0,04076	0,05221
0,10	0,00000	0,00458	0,00915	0,01821	0,03573	0,05192	0,06626	0,07833	0,10132	0,05957
0,15	0,00000	0,00986	0,01968	0,03894	0,07470	0,10460	0,12690	0,14096	0,12219	0,05342
0,20	0,00000	0,01680	0,03344	0,06567	0,12219	0,16295	0,18537	0,19091	0,11754	0,05170
0,25	0,00000	0,02515	0,04994	0,09714	0,17413	0,21908	0,23169	0,22043	0,11052	0,05103
0,30	0,00000	0,03471	0,06873	0,13219	0,22694	0,26757	0,26227	0,23199	0,10650	0,05069
0,35	0,00000	0,04529	0,08940	0,16976	0,27773	0,30565	0,27849	0,23236	0,10439	0,05049
0,40	0,00000	0,05674	0,11160	0,20890	0,32441	0,33286	0,28419	0,22782	0,10317	0,05037
0,45	0,00000	0,06890	0,13498	0,24880	0,36563	0,35032	0,28352	0,22223	0,10238	0,05028
0,50	0,00000	0,08165	0,15927	0,28875	0,40076	0,35998	0,27979	0,21729	0,10185	0,05022

Tabela 2.4: Desvios percentuais não nulos entre $\chi_{BG}(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$.

ξ	x	$\chi_{BG}(x, \xi)$	$\chi(x, \xi)$	$10^{-4}\%$
0,05	6	0,01415	0,01414	7,1
0,15	40	0,05341	0,05342	1,9
0,20	8	0,18538	0,18537	0,5
0,25	6	0,21909	0,21908	0,5
0,25	8	0,23168	0,23169	0,4
0,30	0,5	0,03470	0,03471	2,9
0,35	6	0,30564	0,30565	2,8
0,35	8	0,27850	0,27849	0,4
0,35	20	0,10437	0,10439	1,9
0,40	4	0,32442	0,32441	0,3
0,40	20	0,10316	0,10317	1,0
0,45	6	0,35033	0,35032	0,3
0,45	8	0,28351	0,28352	0,4
0,50	4	0,40075	0,40076	0,2

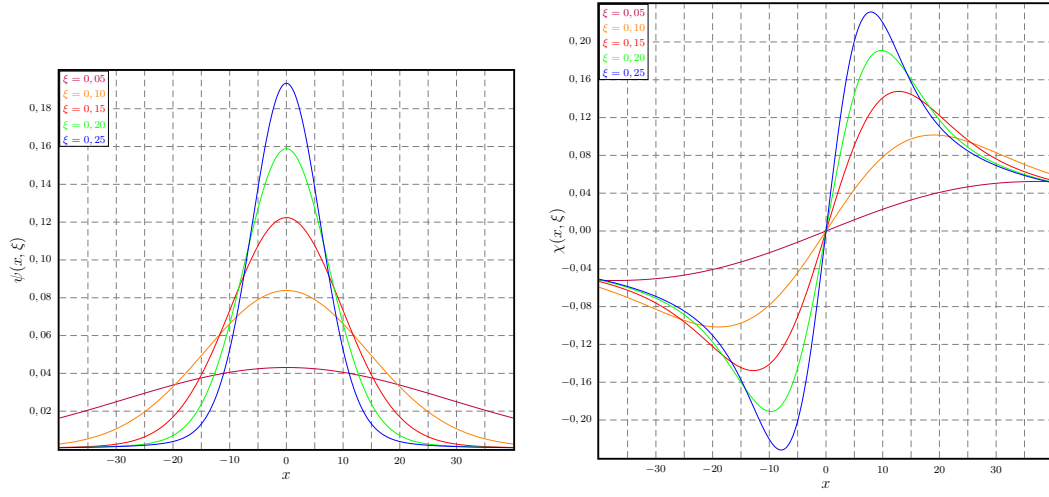
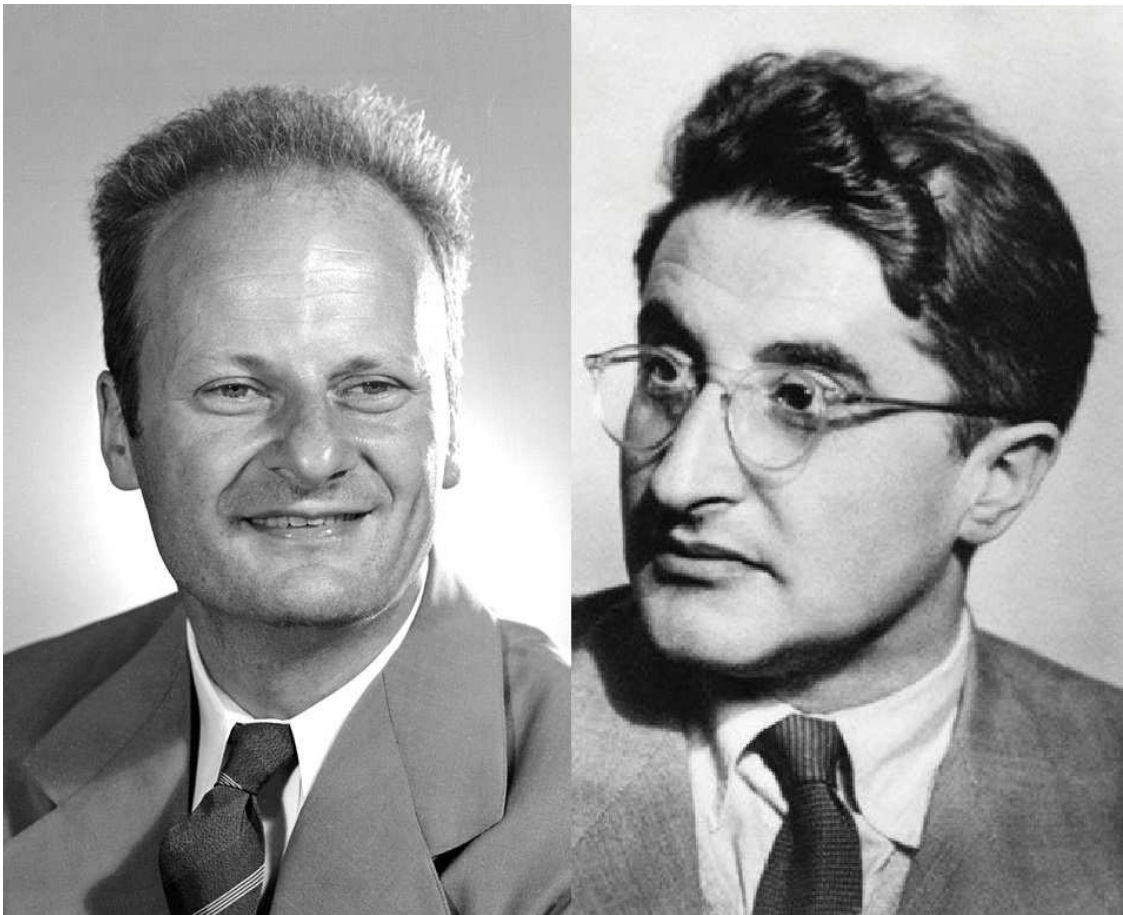


Figura 2.3: Comportamento da Função de Alargamento Doppler e da Função do Termo de Interferência variando ξ .

Capítulo 3

Análise das aproximações de Bethe e Placzek



Hans Albrecht Bethe (1906 - 2005) e George Placzek (1905 - 1955)

Foto de Hans Bhete extraída de https://en.wikipedia.org/wiki/Hans_Bethe e de George Placzek extraída de <https://www.zob.cz/vzdelavani/osobnosti/placzek-georg/>. Acesso em 10 de abr de 2019.

A Função de Alargamento Doppler, estudada no capítulo 2, é baseada em algumas aproximações, propostas em 1937 por Bethe e Placzek [26]. Neste capítulo, o papel de se desconsiderar cada uma destas aproximações é avaliado individualmente, bem como suas combinações em pares, e também é investigado em que situações tais aproximações deixam de ser razoáveis. Tomando como referência a Função de Alargamento Doppler com todas as aproximações de Bethe e Placzek, definida pela Equação (2.47), identifica-se as aproximações mais importantes, correlacionando-as com a física envolvida em cada uma delas.

3.1 Funções de Alargamento Doppler generalizadas

Toma-se como ponto de partida a Equação (2.29), a forma mais geral possível para a Função de Alargamento Doppler baseada na distribuição maxwelliana de velocidades. A fim de se obter para a Função de Alargamento Doppler uma expressão sem nenhum tipo de aproximação, deve-se escrever os argumentos das exponenciais que aparecem na Equação (2.29) em termos das grandezas y e x definidas pelas Equações (2.23) e (2.24), além dos parâmetros nucleares dos isótopos envolvidos. Assim, usa-se as Equações (2.12), (2.14), (2.23) e (2.24) para se escrever o seguinte:

$$v_r(E_{\text{CM}}) = \sqrt{2 \left(\frac{A+1}{A} \right) \frac{E_{\text{CM}}}{m_n}}, \quad (3.1)$$

$$v(E) = \sqrt{\frac{2E}{m_n}}, \quad (3.2)$$

$$E_{\text{CM}}(y) = \frac{\Gamma y}{2} + E_0, \quad (3.3)$$

$$E(x) = \frac{\Gamma x}{2} + E_0. \quad (3.4)$$

Substituindo, então, as Equações (3.3) e (3.4) nas Equações (3.1) e (3.2), respectivamente, se obtém o seguinte:

$$v_r(y) = \sqrt{\frac{\Gamma}{m_n} \left(\frac{A+1}{A} \right) (y + 2E_0/\Gamma)}, \quad (3.5)$$

$$v(x) = \sqrt{\frac{\Gamma}{m_n} (x + 2E_0/\Gamma)}. \quad (3.6)$$

Utilizando as Equações (2.18), (2.30) e (3.4), é possível escrever:

$$\begin{aligned} v_{th} &= \sqrt{\frac{k_B T}{M}} = \sqrt{\frac{4k_B T E A}{(A+1)^2}} \sqrt{\frac{(A+1)^2}{4A^2 m_n E}} = \left(\frac{A+1}{A}\right) \frac{\Gamma_D}{\sqrt{4m_n E}} = \\ &= \left(\frac{A+1}{A}\right) \frac{\Gamma_D}{\sqrt{2m_n \Gamma} \sqrt{x + 2E_0/\Gamma}}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Deste modo, escreve-se os argumentos das exponenciais que aparecem na Equação (2.29) como segue:

$$\begin{aligned} -\frac{(v(x) \pm v_r(y))^2}{2v_{th}^2} &= -\xi^2 \left(\frac{A}{A+1}\right) (x + 2E_0/\Gamma) \times \\ &\times \left[\sqrt{\left(\frac{A}{A+1}\right)} \sqrt{(x + 2E_0/\Gamma)} \pm \sqrt{(y + 2E_0/\Gamma)} \right]^2. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Lançando mão do resultado apresentado na Equação (3.8), escreve-se a seguinte expressão para a Função de Alargamento Doppler:

$$\begin{aligned} \Psi(x, \xi) &= \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{1}{1+y^2} \left[e^{-\xi^2 \Lambda(x) (\sqrt{\Lambda(x)} - \sqrt{\Xi(y)})^2} \right. \\ &\quad \left. - e^{-\xi^2 \Lambda(x) (\sqrt{\Lambda(x)} + \sqrt{\Xi(y)})^2} \right] dy, \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde $\Lambda(x)$ e $\Xi(y)$ são definidas pelas seguintes equações:

$$\Lambda(x) = \left(\frac{A}{A+1}\right) (x + 2E_0/\Gamma), \quad (3.10)$$

$$\Xi(y) = y + 2E_0/\Gamma. \quad (3.11)$$

De acordo com a forma da Equação (3.9), fica evidente que tanto $\Lambda(x)$ quanto $\Xi(y)$ devem ser não-negativas. Assim, torna-se necessário entender o motivo de tais restrições. Para $\Lambda(x)$, temos:

$$\Lambda(x) > 0 \Rightarrow x + \frac{2E_0}{\Gamma} > 0 \Rightarrow \frac{2}{\Gamma} \left(\frac{\Gamma x}{2} + E_0\right) > 0 \Rightarrow E(x) > 0, \quad (3.12)$$

onde se fez uso da Equação (3.4).

Percebe-se, então, que a não-negatividade de $\Lambda(x)$ implica diretamente na não-negatividade de $E(x)$, que nada mais é do que a energia do nêutron incidente, escrita em termos do parâmetro x , definido pela Equação (2.24). Como se trata de uma energia puramente cinética, esta não pode ser negativa, o que justifica fisicamente o fato de que se deve ter $\Lambda(x) > 0$.

Já para $\Xi(y)$, com auxílio de Equação (2.23), tem-se que:

$$\Xi(y) > 0 \Rightarrow y + \frac{2E_0}{\Gamma} > 0 \Rightarrow \frac{2}{\Gamma} \left(\frac{\Gamma y}{2} + E_0 \right) > 0 \Rightarrow E_{\text{CM}}(y) > 0, \quad (3.13)$$

ou seja, de forma análoga, nota-se que a não negatividade de $\Xi(y)$ implica diretamente na não-negatividade de $E_{\text{CM}}(y)$, que consiste na energia cinética do sistema nêutron núcleo no referencial do centro de massa, escrita em termos do parâmetro y , definido pela Equação (2.23), e que de fato deve ser não nula. Pode-se notar, analisando a Equação (3.13), que a restrição imposta para a variável y pelo fato de que $\Xi(y) > 0$ é a seguinte:

$$y > -\frac{2E_0}{\Gamma}, \quad (3.14)$$

o que mostra que o fato de se ter $\Xi(y) > 0$ implica que y deve estar justamente no intervalo de integração da expressão que define $\Psi(x, \xi)$. Assim, pode-se perceber que não existe nenhum tipo de indefinição imposta pelas raízes quadradas que aparecem nos argumentos das funções exponenciais presentes na Equação (3.9). Mas entretanto, deve se ter cautela ao se desconsiderar separadamente cada uma das aproximações de Bethe e Placzek.

A aproximação introduzida pela Equação (2.38) não pode ser considerada de forma isolada, pois se esta for imposta na Equação (3.9), a condição da não negatividade de $\Xi(y)$ não seria respeitada por todos os pontos do intervalo de integração, o que geraria uma indefinição. Assim, a segunda aproximação, definida pela Equação (2.38), só pode ser considerada em conjunto com a terceira, definida pela Equação (2.39). Deste modo, com o intuito de se avaliar as aproximações de Bethe e Placzek, define-se as seguintes funções:

1. $\psi(x, \xi)$: Função de Alargamento Doppler considerando todas as aproximações de Bethe e Placzek;
2. $\psi_1(x, \xi)$: Função de Alargamento Doppler desprezando apenas a primeira aproximação de Bethe e Placzek, dada pela Equação (2.37);
3. $\psi_2(x, \xi)$: Função de Alargamento Doppler desprezando apenas a segunda aproximação de Bethe e Placzek, dada pela Equação (2.38);
4. $\psi_{12}(x, \xi)$: Função de Alargamento Doppler desprezando a primeira e a segunda aproximação de Bethe e Placzek, dadas pelas Equações (2.37) e (2.38);
5. $\psi_{23}(x, \xi)$: Função de Alargamento Doppler desprezando a segunda e a terceira aproximação de Bethe e Placzek, dadas pelas Equações (2.38) e (2.39);
6. $\Psi(x, \xi)$: Função de Alargamento Doppler desprezando todas as aproximações de Bethe e Placzek.

As funções definidas por $\psi(x, \xi)$ e $\Psi(x, \xi)$ já estão estabelecidas pelas equações (2.47) e (3.9), respectivamente. Faz-se necessário a definição das demais.

Para a função definida por $\psi_1(x, \xi)$, deve-se retornar para a Equação (2.29) e usar a aproximação definida na Equação (2.39), com o intuito de se escrever a exponencial que agora não mais será desprezada. Para tal, usam-se as Equações (2.14) e (2.43) para obter:

$$v(x) + v_r(y) \approx \sqrt{\frac{2E}{m_n}} + \frac{(E + E_{\text{CM}})}{\sqrt{2m_n E}} = \frac{3E + E_{\text{CM}}}{\sqrt{2m_n E}}, \quad (3.15)$$

o que leva, com auxílio da Equação (2.30), ao seguinte:

$$\begin{aligned} \frac{(v(x) + v_r(y))^2}{2v_{th}^2} &\approx \frac{M}{2k_B T} \frac{[3E + E_{\text{CM}}]^2}{2m_n E} = \\ &= \frac{M/m_n}{4Ek_B T} [3(E - E_0) + (E_{\text{CM}} - E_0) + 4E_0]^2 = \\ &= \frac{A}{4Ek_B T} \left[\frac{3\Gamma x}{2} + \frac{\Gamma y}{2} + 4E_0 \right]^2 = \\ &= \frac{A\Gamma^2}{4Ek_B T} \left[\frac{3x + y}{2} + \frac{4E_0}{\Gamma} \right]^2, \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde foram usadas as Equações (2.23) e (2.24). Finalmente, com uso das Equações (2.21) e (2.26), pode-se escrever:

$$\frac{(v(x) + v_r(y))^2}{2v_{th}^2} \approx \xi^2 \left[\frac{3x + y}{2} + \frac{4E_0}{\Gamma} \right]^2. \quad (3.17)$$

Com as Equações (2.46) e (3.17), a Equação (2.29) leva a:

$$\psi_1(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1 + y^2} \left[e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2} - e^{-\xi^2 \left(\frac{3x+y}{2} + \frac{4E_0}{\Gamma} \right)^2} \right] dy. \quad (3.18)$$

Para obter $\psi_2(x, \xi)$, basta não estender o limite inferior de integração de $-2E_0/\Gamma$ para $-\infty$ na Equação (2.47):

$$\psi_2(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2}}{1 + y^2} dy. \quad (3.19)$$

Para obter $\psi_{12}(x, \xi)$, basta considerar em conjunto as condições que deram origem às Equações (3.18) e (3.19):

$$\psi_{12}(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{1}{1 + y^2} \left[e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2} - e^{-\xi^2 \left(\frac{3x+y}{2} + \frac{4E_0}{\Gamma} \right)^2} \right] dy. \quad (3.20)$$

Finalmente, para se obter $\psi_{23}(x, \xi)$, deve-se manter o limite inferior de integração em $-2E_0/\Gamma$ e, além disso, a exponencial que aparece na Equação (2.47) não pode ter o seu argumento aproximado, e deve manter a mesma forma exibida na Equação (3.9). Assim, tem-se que:

$$\psi_{23}(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{1}{1+y^2} e^{-\xi^2 \Lambda(x) (\sqrt{\Lambda(x)} - \sqrt{\Xi(y)})^2} dy. \quad (3.21)$$

Nota-se que as funções definidas pelas Equações (3.9), (3.18), (3.19), (3.20) e (3.21) apresentam explicitamente os parâmetros nucleares E_0 e Γ . Assim, para prosseguimento deste estudo, é necessário se considerar ressonâncias específicas, onde tais parâmetros estejam estabelecidos. Os valores dos parâmetros, para as ressonâncias consideradas nesta tese, podem ser visualizados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Parâmetros nucleares para os isotópos ^{238}U e ^{239}Pu .

	$E_0(eV)$	$\Gamma_n(eV)$	$\Gamma_\gamma(eV)$	$\Gamma(eV)$
^{238}U	6,673491	0,00148	0,0230	0,02448
^{239}Pu	0,2964346	0,00008	0,0393	0,03938

Com o intuito de se avaliar o efeito de se desprezar a primeira aproximação de Bethe e Placzek, avalia-se a razão entre as exponenciais que aparecem no integrando da Equação (3.18), através da seguinte expressão:

$$R(x, y) = \frac{e^{-\xi^2 \left(\frac{3x+y}{2} + \frac{4E_0}{\Gamma} \right)^2}}{e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2}}. \quad (3.22)$$

Para realizar tal comparação, escolhe-se $x = y = 0$. Esta escolha é razoável pois a variável $x = 0$ representa um nêutron incidente cuja energia é exatamente a energia da ressonância, e $y = 0$, o valor para a variável de integração onde o integrando que aparece na Equação (2.47) assume o seu valor máximo. Assim, se tem a seguinte grandeza a considerar:

$$R(0, 0) = e^{-\xi^2 \left(\frac{4E_0}{\Gamma} \right)^2}. \quad (3.23)$$

Usando as Equações (2.22) e (2.26), pode-se rescrever a Equação (3.23) como:

$$R(0, 0) = e^{-\frac{4AE_0}{k_B T}}. \quad (3.24)$$

Assim, com os dados da Tabela 3.1, constrói-se a Tabela 3.2, considerando-se as temperaturas 300 K , 800 K e 1500 K .

Tabela 3.2: Ordens de grandeza para $R(0, 0)$ para a ressonância de $6,67eV$ do ^{238}U e a de $0,296eV$ do ^{239}Pu .

	$T = 300K$	$T = 800K$	$T = 1500K$
^{238}U	$10^{-106728}$	10^{-40023}	10^{-21346}
^{239}Pu	10^{-4761}	10^{-1785}	10^{-952}

Como se pode notar na Tabela 3.2, as ordens de grandezas envolvidas são ínfimas, o que leva a concluir que ao se desprezar a primeira das aproximações de Bethe e Placzek não se introduz nenhuma diferença significativa nos valores da Função de Alargamento Doppler.

Para se avaliar o efeito de se desconsiderar a segunda das aproximações de Bethe e Placzek, deve-se lembrar que a Função de Alargamento Doppler, também conhecida como primeira Função de Voigt, nada mais é do que a convolução de uma gaussiana com uma lorentziana. Como parâmetro para se avaliar o efeito de se estender o limite inferior de integração, compara-se o desvio padrão da gaussiana envolvida [39] com o módulo do limite inferior de integração $|L_{\text{inf}}| = 2E_0/\Gamma$. Tal desvio padrão é dependente da temperatura através do parâmetro ξ e é dado por:

$$\sigma_\xi = \frac{\sqrt{2}}{\xi}. \quad (3.25)$$

Assim, usando as Equações (2.26) e (3.25), tem-se:

$$\frac{|L_{\text{inf}}|}{\sigma_\xi} = \frac{2E_0/\Gamma}{\sqrt{2}/\xi} = \frac{2E_0\xi}{\sqrt{2}\Gamma} = \frac{\sqrt{2}E_0}{\Gamma} \frac{\Gamma}{\Gamma_D} = \frac{\sqrt{2}E_0}{\Gamma_D}. \quad (3.26)$$

Com auxílio da Equação (2.22), chega-se finalmente ao seguinte resultado:

$$\frac{|L_{\text{inf}}|}{\sigma_\xi} = \sqrt{\frac{AE_0}{2k_B T}}. \quad (3.27)$$

Na Tabela 3.3 estão reportadas as razões definidas pela Equação (3.27) considerando as temperaturas $300K$, $800K$ e $1500K$ para as ressonâncias estudadas.

Tabela 3.3: Razão entre o módulo do limite inferior de integração e o desvio padrão para a ressonância de $6,67eV$ do ^{238}U e a de $0,296eV$ do ^{239}Pu .

	$T = 300K$	$T = 800K$	$T = 1500K$
	$ L_{\text{inf}} /\sigma_\xi$	$ L_{\text{inf}} /\sigma_\xi$	$ L_{\text{inf}} /\sigma_\xi$
^{238}U	175, 27	107, 33	78, 38
^{239}Pu	37, 02	22, 67	16, 55

Como se pode notar, a menor razão presente na Tabela 3.3 corresponde ao valor de 16,55, considerando a ressonância do plutônio com temperatura de 1500 K. Levando em consideração que para um intervalo de três desvios padrão o erro introduzido ao se truncar o intervalo de integração já é em torno de 0,27%, pode-se concluir que o erro introduzido ao se adotar a segunda das aproximações de Bethe e Placzek, assim como no caso da primeira, também é desprezível.

Conclui-se, então, que tanto a primeira quanto a segunda aproximação de Bethe e Placzek introduzem erros ínfimos no cálculo da Função de Alargamento Doppler, de modo que as expressões dadas pelas Equações (3.18) e (3.19) vão fornecer, na ordem de grandeza usualmente considerada, os mesmos valores que a Equação (2.47). Além disso, estas duas aproximações possuem naturezas diferentes: a primeira é justificada pela razão entre as exponenciais da Equação (3.20), e a segunda justifica-se considerando um pico ressonante estreito e alto. Neste contexto, pode-se concluir que a Função de Alargamento Doppler obtida ao se desconsiderar as duas primeiras aproximações de Bethe e Placzek, definida pela Equação (3.20), também não introduzirá um erro apreciável.

Com o intuito de avaliar a terceira aproximação, a Figura 3.1 mostra, para as duas ressonâncias consideradas, os comportamentos de $\psi(x, \xi)$ e $\psi_{23}(x, \xi)$ em linha contínua e tracejada, respectivamente. Para a ressonância do ^{239}Pu , os gráficos estão tão próximos que parecem superpostos. Para o ^{238}U , percebe-se um desvio para a direita nos gráficos onde a terceira aproximação de Bethe e Placzek foi desprezada.

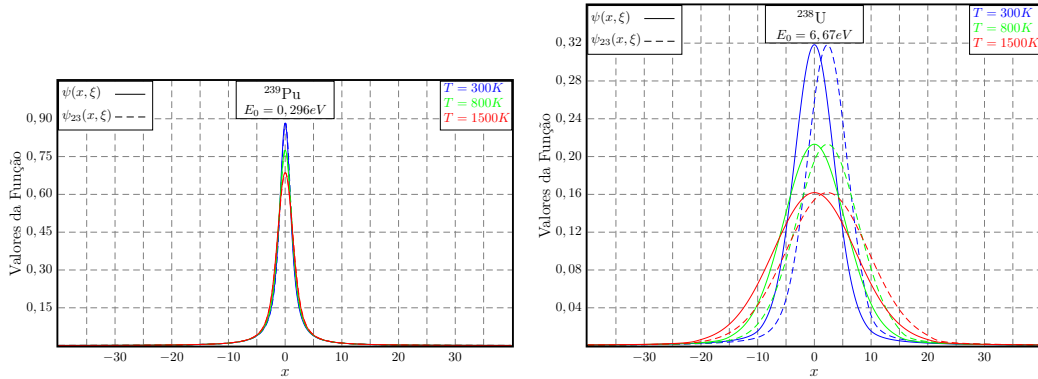


Figura 3.1: Funções de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e $\psi_{23}(x, \xi)$ para a ressonância do ^{239}Pu com energia $E_0 = 0,296\text{eV}$ e para a ressonância do ^{238}U com energia $E_0 = 6,67\text{eV}$ com $T = 300\text{ K}$, $T = 800\text{ K}$ e $T = 1500\text{ K}$.

Para avaliar quantitativamente a diferença entre esses dois comportamentos funcionais, considera-se o caso em que o nêutron incidente tem exatamente a energia de ressonância, $x = 0$. A Figura 3.2 mostra o comportamento em função da temperatura de $\psi(0, \xi)$ e $\psi_{23}(0, \xi)$ para a ressonância do plutônio, e a Figura 3.3 para a ressonância do urânio. O intervalo de temperatura foi escolhido de $T = 300\text{ K}$

a $T = 1500\text{ K}$, por ser o usual em um núcleo de reator nuclear. À direita, pode-se ver o desvio percentual entre a Função de Alargamento Doppler considerando todas as aproximações de Bethe e Placzek $\psi(x, \xi)$ avaliada em $x = 0$ e a Função de Alargamento Doppler $\psi_{23}(x, \xi)$, obtida desconsiderando a segunda e a terceira aproximações. Pode-se notar que o desvio percentual para a ressonância do plutônio é cerca de duas ordens de grandeza inferior à ressonância do urânio. Além disso, o comportamento decrescente dos gráficos para o desvio percentual mostra que as aproximações de Bethe e Placzek tornam-se melhores conforme a temperatura aumenta.

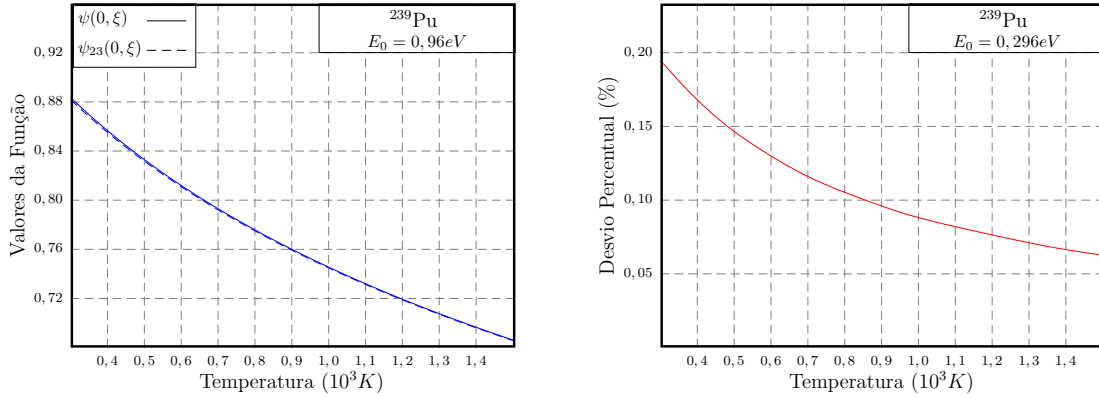


Figura 3.2: Funções de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e $\psi_{23}(x, \xi)$ para a ressonância do ^{239}Pu com energia $E_0 = 0.296\text{ eV}$ para $T = 300\text{ K}$, $T = 800\text{ K}$ e $T = 1500\text{ K}$.

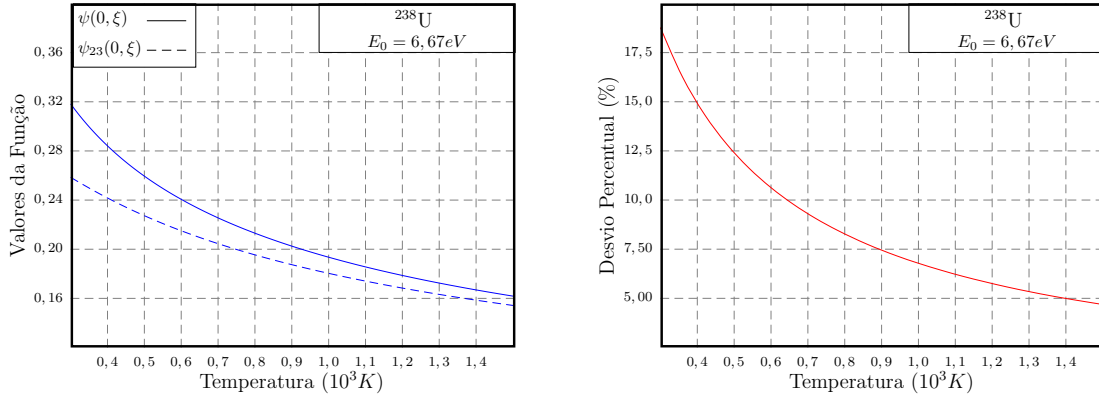


Figura 3.3: Funções de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e $\psi_{23}(x, \xi)$ para a ressonância do ^{238}U com energia $E_0 = 6.67\text{ eV}$ para $T = 300\text{ K}$, $T = 800\text{ K}$ e $T = 1500\text{ K}$.

A primeira das aproximações, definida pela Equação (2.37), pode parecer apenas um argumento matemático a primeira vista, mas esta aproximação se justifica ao se perceber que as velocidades definidas por $v(x)$ e $v_r(y)$ possuem valores grandes, porém próximos, o que faz com que a razão entre diferença e soma destas velocidades seja um número muito pequeno. De fato, levando-se em conta a Equação (1.37),

que fornece a velocidade mais provável para um gás ideal com temperatura T cujas moléculas possuam massa M , pode-se mostrar que, para o intervalo de temperaturas considerado, de 300 K a 1500 K , verifica-se que a velocidade mais provável do nêutron varia, aproximadamente, entre 2200 m/s e 5000 m/s . Além disso, pode-se mostrar que a razão entre os valores mais prováveis para $v(x)$ e $v(y)$ é dada por:

$$\frac{v_{mp}(x)}{v_{r,mp}(y)} = \sqrt{\frac{A}{A+1}}, \quad (3.28)$$

o que fornece, para os isótopos envolvidos, uma razão maior que 0,99.

A segunda das aproximações é baseada no fato da razão entre a altura do pico de energia e a largura prática ser grande em comparação ao desvio padrão da gaussiana que aparece no integrando da Função de Alargamento Doppler em convolução com a lorentziana, e não requer maiores explicações.

Finalmente, com intuito se de entender a tercerira aproximação, substitui-se as Equações (2.12) e (2.14) na Equação (2.39):

$$\sqrt{\frac{1}{2}\mu v_r^2} \approx \sqrt{\frac{1}{2}m_n v^2} \left(1 + \frac{\frac{1}{2}\mu v_r^2 - \frac{1}{2}m_n v^2}{2\frac{1}{2}m_n v^2} \right). \quad (3.29)$$

Considerando o caso de núcleos massivos, se tem $\mu \approx m_n$, assim, pode-se escrever:

$$\begin{aligned} v_r &\approx v \left(1 + \frac{v_r^2 - v^2}{2v^2} \right) = v + \frac{v_r^2 - v^2}{2v} = \frac{v^2 + v_r^2}{2v} \Rightarrow 2vv_r \approx v^2 + v_r^2 \Rightarrow \\ &\Rightarrow v^2 - 2vv_r + v_r^2 \approx 0 \Rightarrow (v - v_r)^2 \approx 0 \Rightarrow v_r \approx v, \end{aligned} \quad (3.30)$$

ou seja, percebe-se que a justificativa para se adotar a terceira das aproximações de Bethe e Placzek é a de se considerar núcleos alvo massivos, e também que a velocidade do nêutron seja muito próxima da velocidade relativa entre nêutron e núcleo alvo. Percebe-se que esta condição física é a mesma utilizada para se justificar a primeira aproximação.

Deve-se destacar que os parâmetros nucleares E_0 e Γ aparecem de forma explícita no integrando da expressão da Função de Alargamento Doppler sem aproximações, dada pela Equação (3.9). Assim, nota-se a possibilidade da investigação da influência da segunda aproximação de Bethe e Placzek também no integrando. Tal investigação é o assunto da seção seguinte.

3.2 Uma abordagem alternativa das aproximações de Bethe e Placzek

No estudo realizado na seção 3.1, foi percebido que a terceira das aproximações de Bethe e Placzek, dada pela Equação (2.39), não pode ser considerada sem se levar em conta, conjuntamente, a segunda delas, dada pela Equação (2.38). Pois caso contrário, seria gerada uma indefinição no integrando oriunda da raiz quadrada de valores negativos. Porém, ao observar o integrando da Equação (3.9), nota-se que este depende dos parâmetros Γ e E_0 , que são os parâmetros envolvidos na segunda das aproximações de Bethe e Placzek. Assim, surge a questão: será que a segunda aproximação também não gera alguma consequência para o integrando? Com o intuito de abordar esta questão, deve-se trabalhar no argumento das exponenciais que aparecem na Equação (3.9), como segue:

$$\begin{aligned} -\xi^2 \Lambda(x) \left(\sqrt{\Lambda(x)} \pm \sqrt{\Xi(y)} \right)^2 &= -\xi^2 \left(\Lambda(x) \pm \sqrt{\Lambda(x)} \sqrt{\Xi(y)} \right)^2 = \\ &= -\xi^2 \left(\Lambda(x) \pm \sqrt{\frac{A}{A+1}} \sqrt{F(x, y)} \right)^2, \end{aligned} \quad (3.31)$$

onde, com auxílio das Equações (3.10) e (3.11), $F(x, y)$ se define do seguinte modo:

$$F(x, y) = \sqrt{(x + 2E_0/\Gamma)(y + 2E_0/\Gamma)}. \quad (3.32)$$

Na Equação (3.32), tem-se uma função de duas variáveis, e deseja-se fazer uma expansão em série de potências em primeira ordem. A expressão completa para este tipo de expansão pode ser escrita como segue [67]:

$$F(x, y) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \sum_{j=0}^n \binom{n}{j} \frac{\partial^n F}{\partial x^{n-j} \partial y^j}(x_0, y_0) (x - x_0)^{n-j} (y - y_0)^j, \quad (3.33)$$

onde $\binom{n}{j}$ é o número binomial, definido por:

$$\binom{n}{j} = \frac{n!}{j!(n-j)!}, \quad (3.34)$$

e também se usa a convenção:

$$\frac{\partial^0 F}{\partial x^0}(x_0, y_0) = \frac{\partial^0 F}{\partial y^0}(x_0, y_0) = F(x_0, y_0). \quad (3.35)$$

Usando a Equação (3.33) até primeira ordem em torno do ponto $(0, 0)$, chega-se

ao seguinte:

$$F(x, y) \approx F(0, 0) + \frac{\partial F}{\partial x}(0, 0)x + \frac{\partial F}{\partial y}(0, 0)y, \quad (3.36)$$

assim, aplicando a derivada parcial em relação a x na Equação (3.32):

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x}(x, y) &= \frac{\frac{\partial}{\partial x} [(x + 2E_0/\Gamma)(y + 2E_0/\Gamma)]}{2\sqrt{(x + 2E_0/\Gamma)(y + 2E_0/\Gamma)}} = \\ &= \frac{y + 2E_0/\Gamma}{2\sqrt{(x + 2E_0/\Gamma)(y + 2E_0/\Gamma)}} = \frac{y + 2E_0/\Gamma}{2F(x, y)}. \end{aligned} \quad (3.37)$$

De maneira análoga, tem-se:

$$\frac{\partial F}{\partial y}(x, y) = \frac{x + 2E_0/\Gamma}{2F(x, y)}, \quad (3.38)$$

o que leva aos seguintes coeficientes para a expansão pretendida:

$$F(0, 0) = \frac{2E_0}{\Gamma}, \quad \frac{\partial F}{\partial x}(0, 0) = \frac{\partial F}{\partial y}(0, 0) = \frac{1}{2}. \quad (3.39)$$

Finalmente, substituindo a Equação (3.39) na Equação (3.36):

$$F(x, y) \approx \frac{2E_0}{\Gamma} + \frac{x + y}{2}. \quad (3.40)$$

Com o resultado da Equação (3.40), se faz a seguinte aproximação na Equação (3.31):

$$\begin{aligned} -\xi^2 \Lambda(x) \left(\sqrt{\Lambda(x)} \pm \sqrt{\Xi(y)} \right)^2 &\approx -\xi^2 \left[\left(\frac{A}{A+1} \right) \left(x + \frac{2E_0}{\Gamma} \right) + \right. \\ &\quad \left. \pm \sqrt{\frac{A}{A+1}} \left(\frac{x+y}{2} + \frac{2E_0}{\Gamma} \right) \right]^2. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Definindo

$$\alpha(A) = \sqrt{\frac{A}{A+1}}, \quad (3.42)$$

é possível escrever:

$$\begin{aligned} -\xi^2 \Lambda(x) \left(\sqrt{\Lambda(x)} \pm \sqrt{\Xi(y)} \right)^2 &= -\xi^2 \alpha^2(A) \left[\left(\alpha(A) \pm \frac{1}{2} \right) x \pm \frac{y}{2} + \right. \\ &\quad \left. + (\alpha(A) \pm 1) \frac{2E_0}{\Gamma} \right]^2. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Ao considerar o caso de núcleos alvo massivos, pode-se aproximar $\alpha(A) \approx 1$, e a

Equação (3.43) assume a seguinte forma:

$$-\xi^2 \Lambda(x) \left(\sqrt{\Lambda(x)} \pm \sqrt{\Xi(y)} \right)^2 = -\xi^2 \left[\left(1 \pm \frac{1}{2} \right) x \pm \frac{y}{2} + (1 \pm 1) \frac{2E_0}{\Gamma} \right]^2, \quad (3.44)$$

que leva aos seguintes resultados:

$$-\xi^2 \Lambda(x) \left(\sqrt{\Lambda(x)} + \sqrt{\Xi(y)} \right)^2 = -\xi^2 \left(\frac{3x+y}{2} + \frac{4E_0}{\Gamma} \right)^2, \quad (3.45)$$

$$-\xi^2 \Lambda(x) \left(\sqrt{\Lambda(x)} - \sqrt{\Xi(y)} \right)^2 = -\frac{\xi^2}{4} (x-y)^2. \quad (3.46)$$

Substituindo as Equações (3.45) e (3.46) na Equação (3.9), percebe-se que é obtido exatamente o resultado apresentado na Equação (3.20). A Equação (3.20) foi obtida usando a terceira aproximação de Bethe e Placzek nos argumentos das exponencias presentes na Equação (2.29), através dos resultados intermediários apresentados nas Equações (2.46) e (3.16). Curiosamente, ao se considerar no integrando a utilização da segunda aproximação de Bethe e Placzek, chega-se exatamente ao mesmo resultado, como apresentado nas Equações (3.45) e (3.46).

Capítulo 4

Fenômeno de Alargamento Doppler com Estatística de Tsallis



Fachada do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF), localizado no bairro da Urca, no município do Rio de Janeiro - RJ - Brasil.

Imagem extraída de <https://portal.cbpf.br>. Acesso em 30 de abr de 2019.

4.1 Funções de Voigt com estatística de Tsallis

Considera-se, agora, uma distribuição de núcleos alvo obedecendo a distribuição de Tsallis, definida pelas Equações (1.57), (1.63) e (1.72). Segue-se, basicamente, os mesmos passos do capítulo 2. Como tal distribuição também é isotrópica, sua formulação matemática preserva a propriedade de paridade na variável V , e as Equações (2.28) e (2.35) podem ser utilizadas. Porém, deve-se ter cautela com os limites de integração na variável y , pois como foi visto no capítulo 1, a distribuição de Tsallis introduz um corte para as velocidades permitidas, como ilustrado na Equação (1.61). Assim, pode-se definir a *Função de Alargamento Doppler de Tsallis* e a *Função do Termo de Interferência de Tsallis* como segue:

$$\Psi_q(x, \xi) = \pi \sqrt{\frac{2k_B T}{M}} A_q \xi \int_{L_{\inf}}^{L_{\sup}} \frac{1}{1+y^2} \int_{v(x)-v_r(y)}^{v(x)+v_r(y)} V \exp_{2-q} \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) dV dy, \quad (4.1)$$

$$X_q(x, \xi) = 2\pi \sqrt{\frac{2k_B T}{M}} A_q \xi \int_{L_{\inf}}^{L_{\sup}} \frac{y}{1+y^2} \int_{v(x)-v_r(y)}^{v(x)+v_r(y)} V \exp_{2-q} \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) dV dy, \quad (4.2)$$

onde os limites de integração L_{\inf} e L_{\sup} dependem do corte de velocidades supracitado, e devem ser determinados. Para trabalhar com as Equações (4.1) e (4.2), faz-se necessário a determinação da integral da função \exp_q :

$$\int \exp_q(\alpha) d\alpha = \int [1 + (1-q)\alpha]^{\frac{1}{1-q}} d\alpha. \quad (4.3)$$

Para realizar tal integração, faz-se uso de uma substituição simples do tipo:

$$u = 1 + (1-q)\alpha \rightarrow du = (1-q)d\alpha, \quad (4.4)$$

assim:

$$\begin{aligned} \int \exp_q(\alpha) d\alpha &= \frac{1}{(1-q)} \int u^{\frac{1}{1-q}} du = \frac{1}{(1-q)} \frac{u^{\frac{1}{1-q}+1}}{\left(\frac{1}{1-q}+1\right)} + C = \\ &= \frac{1}{(2-q)} u^{\frac{1}{1-q}+1} + C. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Finalmente, ao voltar para a variável α , se obtém:

$$\begin{aligned} \int \exp_q(\alpha) d\alpha &= \frac{1}{(2-q)} [1 + (1-q)\alpha]^{\frac{1}{1-q}+1} + C = \\ &= \frac{1}{(2-q)} [1 + (1-q)\alpha] \exp_q(\alpha) + C. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Definindo-se a função:

$$\text{iexp}_q(\alpha) = \frac{1}{(2-q)} [1 + (1-q)\alpha] \exp_q(\alpha), \quad (4.7)$$

chega-se a:

$$\int \exp_q(\alpha) d\alpha = \text{iexp}_q(\alpha) + C, \quad (4.8)$$

onde deve-se reparar que a função iexp_q também pode ser escrita como:

$$\text{iexp}_q(\alpha) = \frac{1}{(2-q)} [1 + (1-q)\alpha]^{\frac{2-q}{1-q}}, \quad (4.9)$$

porém, o que se precisa, de acordo com a Equação (4.1), é da integral da função iexp_{2-q} , o que se consegue facilmente trocando-se q por $2-q$ nas equações (4.7), (4.8) e (4.9).

$$\text{iexp}_{2-q}(\alpha) = \frac{1}{q} [1 + (q-1)\alpha] \exp_{2-q}(\alpha) = \frac{1}{q} [1 + (q-1)\alpha]^{\frac{q}{q-1}}, \quad (4.10)$$

$$\int \exp_{2-q}(\alpha) d\alpha = \text{iexp}_{2-q}(\alpha) + C. \quad (4.11)$$

Para resolver a integral na variável V que aparece nas Equações (4.1) e (4.2), é feita uma substituição simples do tipo $u = -V^2/2v_{th}^2$, além de se fazer uso das Equações (2.30) e (4.11). O resultado obtido é o seguinte:

$$\begin{aligned} \int_{v(x)-v_r(y)}^{v(x)+v_r(y)} V \exp_{2-q} \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) dV &= \text{iexp}_{2-q} \left[-\frac{(v(x) - v_r(y))^2}{2v_{th}^2} \right] + \\ &- \text{iexp}_{2-q} \left[-\frac{(v(x) + v_r(y))^2}{2v_{th}^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Impondo na Equação (4.12) os resultados advindos das aproximações de Bethe e Placzek, como dados pelas Equações (2.37) e (2.46), se chega ao seguinte resultado:

$$\int_{v(x)-v_r(y)}^{v(x)+v_r(y)} V \exp_{2-q} \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) dV \approx \text{iexp}_{2-q} \left[-\frac{\xi^2}{4} (x-y)^2 \right] \quad (4.13)$$

A função iexp_{2-q} que aparece na Equação (4.13) é definida em termos da função \exp_{2-q} . Assim, seu argumento também deve respeitar a natureza positiva que deu

origem ao resultado apresentado na Equação (1.61). Deste modo, se tem o seguinte:

$$1 + (q - 1) \left(-\frac{\xi^2}{4} (x - y)^2 \right) \geq 0 \Rightarrow (x - y)^2 \leq \frac{4}{\xi^2(q - 1)}. \quad (4.14)$$

Esta condição pode ser escrita como:

$$x - x_q \leq y \leq x + x_q, \quad (4.15)$$

onde

$$x_q = \frac{2}{\xi \sqrt{q - 1}}. \quad (4.16)$$

Assim, ao se considerar também a segunda aproximação de Bethe e Placzek, dada pela Equação (2.38), os limites de integração para a variável y que aparecem nas Equações (4.1) e (4.2) são dados por:

$$L_{\text{inf}} = x - x_q, \quad (4.17)$$

$$L_{\text{sup}} = x + x_q. \quad (4.18)$$

De posse dos limites de integração, após a substituição das Equações (4.13), (4.17) e (4.18) nas Equações (4.1) e (4.2), chega-se aos seguintes resultados:

$$\Psi_q(x, \xi) \approx \psi_q(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} B_q \int_{x-x_q}^{x+x_q} \frac{1}{1+y^2} \text{iexp}_{2-q} \left[-\frac{\xi^2}{4} (x-y)^2 \right] dy, \quad (4.19)$$

$$X_q(x, \xi) \approx \chi_q(x, \xi) = \frac{\xi}{\sqrt{\pi}} B_q \int_{x-x_q}^{x+x_q} \frac{y}{1+y^2} \text{iexp}_{2-q} \left[-\frac{\xi^2}{4} (x-y)^2 \right] dy, \quad (4.20)$$

onde define-se B_q como:

$$B_q = A_q \left(\frac{2\pi k_B T}{M} \right)^{3/2} = \frac{1}{4} (q-1)^{1/2} (3q-1) (1+q) \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{q-1}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)}, \quad (4.21)$$

Pode-se chamar estas novas Funções de *Funções de Voigt q -deformadas* ou *Funções de Voigt com estatística de Tsallis*.

4.2 Resultados

Nesta seção, os resultados obtidos para a Função de Alargamento Doppler de Tsallis $\psi_q(x, \xi)$, assim como para a Função do Termo de Interferência de Tsallis $\chi_q(x, \xi)$, deduzidos nesta tese, são reportados. São apresentados resultados tanto

na forma de tabelas como na forma de gráficos. Assim, é possível fazer uma análise quantitativa e também qualitativa dos resultados obtidos. Para avaliar as integrais nas Equações (4.19) e (4.20), utiliza-se o método de quadratura de Gauss-Legendre com 15 pontos [66], cujos pontos de Legendre x_i utilizados e seus respectivos pesos encontram-se na Tabela B.1, no Apêndice B.

É amplamente conhecido o fato dos reatores nucleares em operação atualmente possuírem seus projetos baseados na distribuição de Maxwell-Boltzmann. Assim, para alguma condição operacional além das bases do projeto, ou em novos projetos de reatores que possam ser desenvolvidos, pode ser relevante considerar outro tipo de distribuição de velocidades, embora não se espere um grande desvio da distribuição maxwelliana. Assim, para estudar a influência de algum desvio do comportamento maxwelliano, o intervalo do caso não deformado $q = 1,0$ até $q = 1,5$, com um incremento de $0,1$, foi o considerado. Nesta faixa de valores, é possível estudar a influência de se utilizar a distribuição de Tsallis na descrição do Fenômeno de Alargamento Doppler.

Nas Tabelas 4.1 a 4.5 podem ser encontrados, para o intervalo escolhido para o parâmetro q , os valores para a Função de Alargamento Doppler de Tsallis, assim como seus respectivos desvios percentuais em relação aos valores da Função de Alargamento Doppler usual, mostrados na Tabela 2.1. Tais valores foram calculados usando as Equações (4.19) e (B.2). As Figuras 4.1 a 4.5 ilustram o comportamento da Função de Alargamento Doppler de Tsallis definida pela Equação (4.19) para vários valores do parâmetro q , bem como a Função de Alargamento Doppler maxwelliana dada pela Equação (2.47), considerando alguns valores para o parâmetro ξ .

Nas Tabelas 4.6 a 4.10, são apresentados os resultados para a Função do Termo de Interferência de Tsallis e seus respectivos desvios percentuais dos valores da Função do Termo de Interferência usual mostrados na Tabela 2.3. Finalmente, nas Figuras 4.6 a 4.10 estão representadas a Função do Termo de Interferência de Tsallis definido pela Equação (4.20) juntamente com a Função de Termo de Interferência maxwelliana, dada pela Equação (2.48).

Tabela 4.1: Valores da Função de Alargamento Doppler de Tsallis para $q = 1,1$ calculados utilizando a Equação (4.19).

A função $\psi_q(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\psi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%
0,05	0,04663	8,2	0,04662	8,2	0,04660	8,2	0,04651	8,2	0,04614	8,1	0,04552	8,0	0,04467	7,8	0,04361	7,5	0,03558	5,3	0,01526	6,9
0,10	0,09058	8,0	0,09052	8,0	0,09034	8,0	0,08964	7,9	0,08688	7,6	0,08245	7,1	0,07660	6,3	0,06965	5,2	0,03084	6,3	0,00135	48,5
0,15	0,13202	7,9	0,13183	7,9	0,13127	7,8	0,12904	7,6	0,12048	6,9	0,10739	5,6	0,09131	3,7	0,07398	1,0	0,01242	26,7	0,00073	8,8
0,20	0,17111	7,7	0,17069	7,7	0,16943	7,6	0,16449	7,3	0,14604	6,0	0,11962	3,7	0,09025	0,0	0,06266	5,3	0,00462	35,2	0,00068	2,9
0,25	0,20802	7,5	0,20724	7,5	0,20492	7,4	0,19589	6,9	0,16346	4,9	0,12068	1,1	0,07879	4,8	0,04577	12,9	0,00322	18,3	0,00066	1,5
0,30	0,24287	7,4	0,24160	7,3	0,23781	7,1	0,22326	6,5	0,17328	3,6	0,11349	1,9	0,06322	10,2	0,03106	20,0	0,00292	7,0	0,00065	0,0
0,35	0,27580	7,2	0,27389	7,1	0,26822	6,9	0,24670	6,0	0,17649	2,1	0,10146	5,3	0,04844	15,4	0,02148	23,7	0,00278	3,8	0,00064	0,0
0,40	0,30694	7,0	0,30423	6,9	0,29626	6,7	0,26639	5,5	0,17439	0,5	0,08766	8,7	0,03697	19,1	0,01635	22,5	0,00270	2,5	0,00064	0,0
0,45	0,33639	6,9	0,33274	6,8	0,32203	6,4	0,28256	5,0	0,16834	1,3	0,07439	11,8	0,02925	20,3	0,01388	17,7	0,00266	1,5	0,00063	1,6
0,50	0,36426	6,7	0,35952	6,6	0,34566	6,2	0,29548	4,5	0,15967	3,0	0,06297	14,3	0,02452	18,9	0,01266	12,4	0,00262	1,5	0,00063	0,0

Tabela 4.2: Valores da Função de Alargamento Doppler de Tsallis para $q = 1, 2$ calculados utilizando a Equação (4.19).

A função $\psi_q(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\psi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%
0,05	0,04992	15,9	0,04991	15,9	0,04988	15,8	0,04977	15,8	0,04934	15,6	0,04862	15,3	0,04763	14,9	0,04638	14,4	0,03702	9,5	0,01381	15,7
0,10	0,09680	15,5	0,09673	15,4	0,09653	15,4	0,09571	15,2	0,09248	14,6	0,08731	13,4	0,08049	11,7	0,07240	9,3	0,02816	14,4	0,00091	65,3
0,15	0,14087	15,1	0,14065	15,1	0,13999	15,0	0,13739	14,6	0,12741	13,1	0,11218	10,4	0,09354	6,2	0,07362	0,5	0,00858	49,4	0,00071	11,3
0,20	0,18230	14,7	0,18181	14,7	0,18035	14,5	0,17458	13,9	0,15312	11,1	0,12253	6,2	0,08891	1,5	0,05812	12,1	0,00360	49,5	0,00067	4,3
0,25	0,22129	14,4	0,22038	14,3	0,21768	14,1	0,20717	13,1	0,16955	8,8	0,12041	0,9	0,07356	11,1	0,03872	26,3	0,00302	23,4	0,00065	3,0
0,30	0,25798	14,0	0,25650	13,9	0,25210	13,6	0,23519	12,2	0,17742	6,1	0,10962	5,3	0,05542	21,3	0,02443	37,1	0,00283	9,9	0,00064	1,5
0,35	0,29254	13,7	0,29032	13,5	0,28374	13,1	0,25878	11,2	0,17803	3,0	0,09443	11,9	0,04022	29,8	0,01705	39,5	0,00272	5,9	0,00064	0,0
0,40	0,32510	13,4	0,32196	13,2	0,31271	12,6	0,27815	10,2	0,17300	0,3	0,07862	18,1	0,03011	34,1	0,01400	33,6	0,00266	4,0	0,00063	1,6
0,45	0,35580	13,0	0,35158	12,8	0,33917	12,1	0,29360	9,1	0,16404	3,8	0,06472	23,3	0,02444	33,4	0,01267	24,9	0,00263	2,6	0,00063	1,6
0,50	0,38476	12,7	0,37927	12,4	0,36325	11,6	0,30546	8,0	0,15279	7,2	0,05392	26,6	0,02148	29,0	0,01195	17,4	0,00260	2,3	0,00063	0,0

Tabela 4.3: Valores da Função de Alargamento Doppler de Tsallis para $q = 1, 3$ calculados utilizando a Equação (4.19).

A função $\psi_q(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\psi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%
0,05	0,05298	23,0	0,05297	23,0	0,05294	22,9	0,05282	22,9	0,05232	22,6	0,05149	22,1	0,05035	21,5	0,04892	20,6	0,03816	12,9	0,01212	26,1
0,10	0,10260	22,4	0,10252	22,4	0,10228	22,3	0,10134	22,0	0,09763	20,9	0,09169	19,1	0,08386	16,3	0,07460	12,6	0,02506	23,9	0,00083	68,3
0,15	0,14908	21,8	0,14883	21,8	0,14808	21,6	0,14509	21,0	0,13363	18,6	0,11617	14,3	0,09491	7,8	0,07240	1,2	0,00584	65,5	0,00069	13,8
0,20	0,19265	21,2	0,19209	21,2	0,19040	20,9	0,18379	19,9	0,15921	15,6	0,12433	7,7	0,08651	4,2	0,05286	20,1	0,00329	53,9	0,00066	5,7
0,25	0,23351	20,7	0,23247	20,6	0,22938	20,2	0,21734	18,6	0,17437	11,9	0,11886	0,4	0,06751	18,4	0,03199	39,1	0,00292	25,9	0,00065	3,0
0,30	0,27185	20,2	0,27016	20,0	0,26512	19,4	0,24578	17,2	0,18006	7,6	0,10453	9,7	0,04770	32,3	0,01953	49,7	0,00277	11,8	0,00064	1,5
0,35	0,30785	19,6	0,30530	19,4	0,29778	18,7	0,26929	15,7	0,17792	2,9	0,08666	19,1	0,03338	41,7	0,01472	47,7	0,00269	6,9	0,00064	0,0
0,40	0,34166	19,1	0,33807	18,8	0,32751	17,9	0,28813	14,1	0,16995	2,1	0,06970	27,4	0,02555	44,1	0,01295	38,6	0,00264	4,7	0,00063	1,6
0,45	0,37343	18,6	0,36861	18,3	0,35447	17,1	0,30268	12,5	0,15827	7,2	0,05626	33,3	0,02186	40,4	0,01208	28,4	0,00261	3,3	0,00063	1,6
0,50	0,40331	18,2	0,39706	17,7	0,37882	16,4	0,31332	10,8	0,14482	12,1	0,04700	36,0	0,02000	33,9	0,01155	20,1	0,00258	3,0	0,00063	0,0

Tabela 4.4: Valores da Função de Alargamento Doppler de Tsallis para $q = 1, 4$ calculados utilizando a Equação (4.19).

A função $\psi_q(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\psi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%
0,05	0,05587	29,7	0,05586	29,7	0,05583	29,7	0,05568	29,5	0,05511	29,2	0,05418	28,5	0,05288	27,6	0,05125	26,4	0,03905	15,5	0,01029	37,2
0,10	0,10804	28,9	0,10795	28,8	0,10768	28,7	0,10661	28,4	0,10240	26,8	0,09566	24,2	0,08678	20,4	0,07630	15,2	0,02170	34,1	0,00079	69,8
0,15	0,15676	28,1	0,15648	28,0	0,15562	27,8	0,15223	27,0	0,13924	23,6	0,11949	17,6	0,09555	8,5	0,07046	3,8	0,00440	74,0	0,00068	15,0
0,20	0,20230	27,3	0,20166	27,2	0,19975	26,8	0,19226	25,4	0,16445	19,4	0,12521	8,5	0,08327	7,8	0,04720	28,6	0,00314	56,0	0,00066	5,7
0,25	0,24487	26,6	0,24369	26,4	0,24019	25,8	0,22657	23,6	0,17811	14,3	0,11627	2,6	0,06102	26,3	0,02614	50,2	0,00285	27,7	0,00064	4,5
0,30	0,28469	25,8	0,28278	25,6	0,27708	24,8	0,25524	21,7	0,18145	8,5	0,09860	14,8	0,04065	42,3	0,01654	57,4	0,00273	13,1	0,00064	1,5
0,35	0,32197	25,1	0,31910	24,8	0,31060	23,8	0,27848	19,7	0,17647	2,1	0,07868	26,6	0,02838	50,4	0,01359	51,7	0,00266	8,0	0,00063	1,6
0,40	0,35687	24,4	0,35283	24,0	0,34092	22,7	0,29663	17,5	0,16564	4,6	0,06156	35,9	0,02293	49,8	0,01237	41,4	0,00262	5,4	0,00063	1,6
0,45	0,38958	23,8	0,38415	23,3	0,36823	21,7	0,31012	15,2	0,15151	11,1	0,04956	41,3	0,02048	44,2	0,01171	30,6	0,00259	4,1	0,00063	1,6
0,50	0,42024	23,1	0,41320	22,5	0,39271	20,6	0,31943	12,9	0,13636	17,2	0,04228	42,4	0,01914	36,7	0,01129	21,9	0,00257	3,4	0,00063	0,0

Tabela 4.5: Valores da Função de Alargamento Doppler de Tsallis para $q = 1, 5$ calculados utilizando a Equação (4.19).

A função $\psi_q(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\psi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%	$\psi_q(x, \xi)$	%
0,05	0,05861	36,0	0,05860	36,0	0,05856	36,0	0,05840	35,9	0,05776	35,4	0,05670	34,5	0,05525	33,3	0,05341	31,7	0,03972	17,5	0,00840	48,7
0,10	0,11317	35,0	0,11307	34,9	0,11277	34,8	0,11156	34,3	0,10683	32,3	0,09927	28,9	0,08932	23,9	0,07758	17,1	0,01824	44,6	0,00076	71,0
0,15	0,16399	34,0	0,16367	33,9	0,16271	33,6	0,15891	32,5	0,14434	28,1	0,12223	20,2	0,09556	8,5	0,06792	7,3	0,00384	77,3	0,00068	15,0
0,20	0,21134	33,0	0,21062	32,8	0,20848	32,4	0,20008	30,5	0,16896	22,6	0,12530	8,6	0,07936	12,1	0,04144	37,3	0,00304	57,4	0,00065	7,1
0,25	0,25548	32,1	0,25417	31,8	0,25024	31,1	0,23499	28,2	0,18093	16,1	0,11283	5,5	0,05444	34,2	0,02158	58,9	0,00280	28,9	0,00064	4,5
0,30	0,29666	31,1	0,29451	30,8	0,28814	29,8	0,26373	25,8	0,18177	8,7	0,09214	20,4	0,03472	50,7	0,01495	61,5	0,00270	14,0	0,00064	1,5
0,35	0,33508	30,2	0,33187	29,8	0,32239	28,5	0,28656	23,1	0,17395	0,6	0,07094	33,8	0,02518	56,0	0,01293	54,1	0,00264	8,7	0,00063	1,6
0,40	0,37096	29,3	0,36645	28,8	0,35316	27,1	0,30388	20,4	0,16042	7,6	0,05469	43,1	0,02143	53,1	0,01199	43,2	0,00260	6,1	0,00063	1,6
0,45	0,40448	28,5	0,39842	27,8	0,38069	25,8	0,31619	17,5	0,14422	15,4	0,04473	47,0	0,01962	46,5	0,01145	32,1	0,00258	4,4	0,00063	1,6
0,50	0,43581	27,7	0,42798	26,9	0,40519	24,5	0,32408	14,6	0,12793	22,3	0,03926	46,6	0,01857	38,6	0,01111	23,2	0,00256	3,8	0,00063	0,0

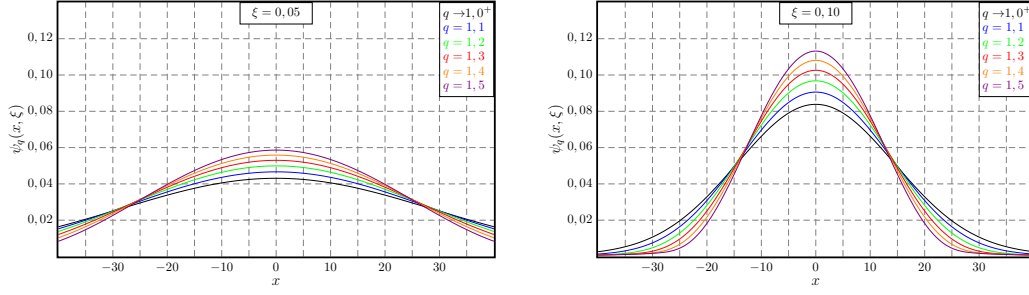


Figura 4.1: Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Tsallis variando q para $\xi = 0,05$ (à esquerda) e $\xi = 0,10$ (à direita).

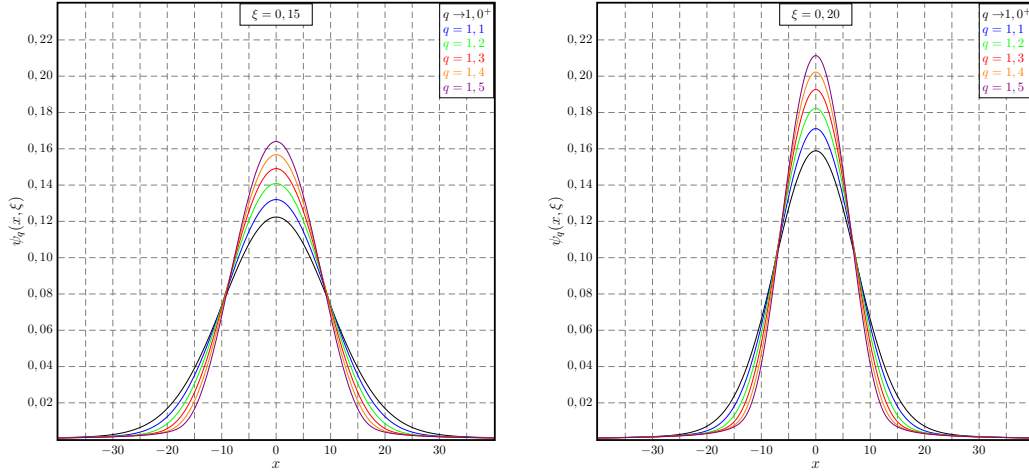


Figura 4.2: Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Tsallis variando q para $\xi = 0,15$ (à esquerda) e $\xi = 0,20$ (à direita).

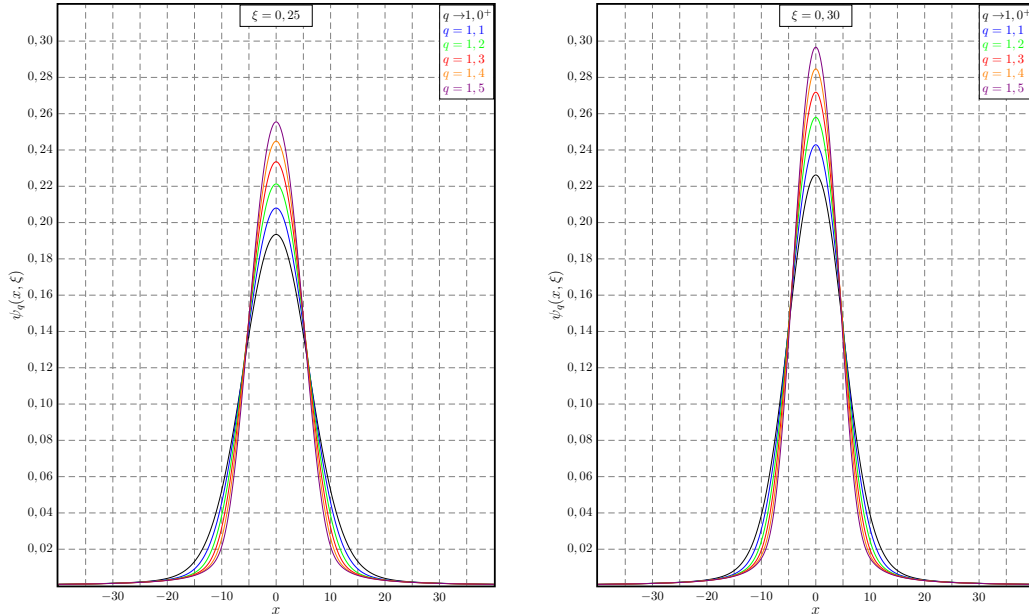


Figura 4.3: Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Tsallis variando q para $\xi = 0,25$ (à esquerda) e $\xi = 0,30$ (à direita).

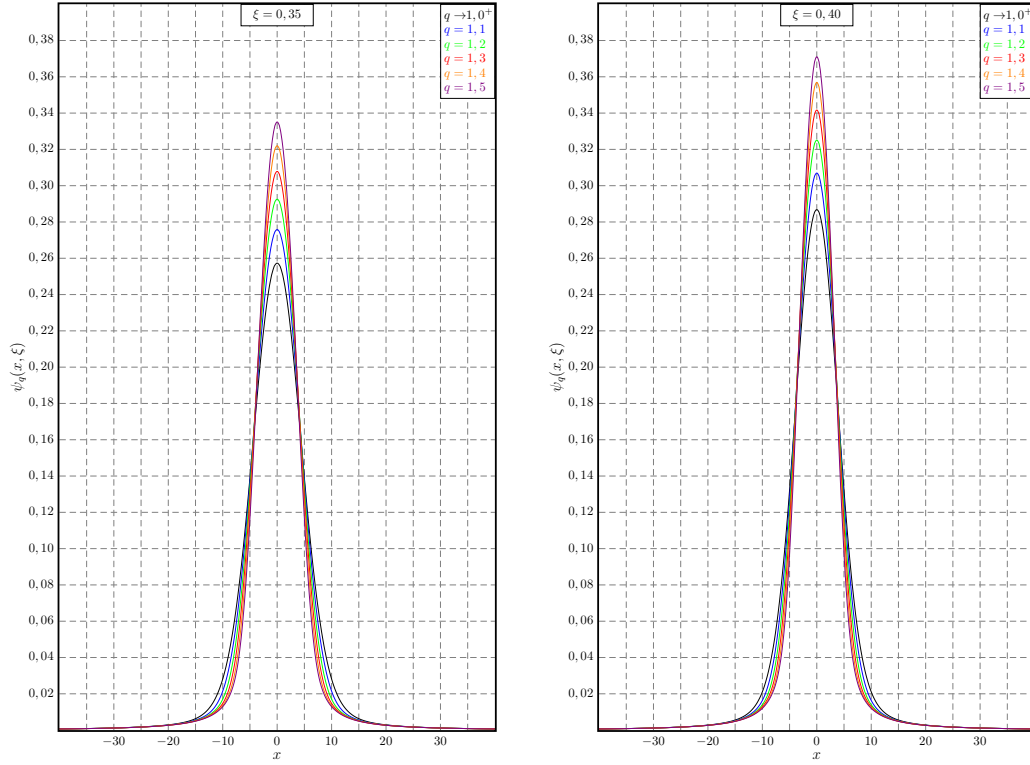


Figura 4.4: Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Tsallis variando q para $\xi = 0,35$ (à esquerda) e $\xi = 0,40$ (à direita).

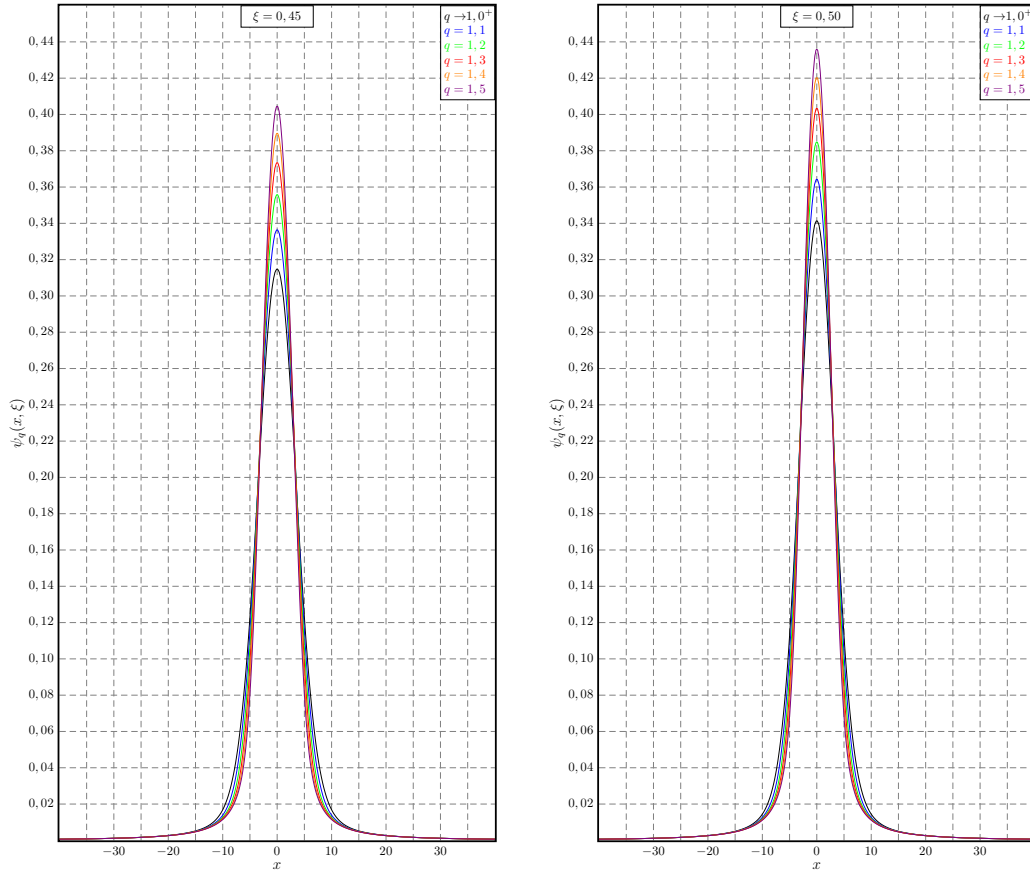


Figura 4.5: Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Tsallis variando q para $\xi = 0,45$ (à esquerda) e $\xi = 0,50$ (à direita).

Tabela 4.6: Valores da Função do Termo de Interferência de Tsallis para $q = 1,1$ calculados de acordo com a Equação (4.20).

A função $\chi_q(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\chi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%
0,05	0,00000	0,0	0,00137	14,2	0,00275	15,1	0,00548	14,6	0,01091	14,7	0,01623	14,8	0,02138	14,6	0,02631	14,5	0,04634	13,7	0,05696	9,1
0,10	0,00000	0,0	0,00525	14,6	0,01048	14,5	0,02086	14,6	0,04089	14,4	0,05932	14,3	0,07548	13,9	0,08889	13,5	0,11042	9,0	0,05752	3,4
0,15	0,00000	0,0	0,01129	14,5	0,02251	14,4	0,04452	14,3	0,08519	14,0	0,11874	13,5	0,14304	12,7	0,15728	11,6	0,12401	1,5	0,05252	1,7
0,20	0,00000	0,0	0,01919	14,2	0,03818	14,2	0,07491	14,1	0,13871	13,5	0,18335	12,5	0,20567	11,0	0,20764	8,8	0,11413	2,9	0,05131	0,8
0,25	0,00000	0,0	0,02867	14,0	0,05692	14,0	0,11051	13,8	0,19657	12,9	0,24368	11,2	0,25174	8,7	0,23215	5,3	0,10762	2,6	0,05080	0,5
0,30	0,00000	0,0	0,03950	13,8	0,07818	13,7	0,14997	13,5	0,25448	12,1	0,29339	9,6	0,27802	6,0	0,23645	1,9	0,10479	1,6	0,05054	0,3
0,35	0,00000	0,0	0,05146	13,6	0,10149	13,5	0,19200	13,1	0,30904	11,3	0,32967	7,9	0,28776	3,3	0,23085	0,6	0,10330	1,0	0,05038	0,2
0,40	0,00000	0,0	0,06435	13,4	0,12641	13,3	0,23551	12,7	0,35783	10,3	0,35268	6,0	0,28705	1,0	0,22323	2,0	0,10240	0,7	0,05029	0,2
0,45	0,00000	0,0	0,07800	13,2	0,15257	13,0	0,27951	12,3	0,39945	9,2	0,36459	4,1	0,28161	0,7	0,21701	2,3	0,10181	0,6	0,05022	0,1
0,50	0,00000	0,0	0,09225	13,0	0,17963	12,8	0,32320	11,9	0,43333	8,1	0,36846	2,4	0,27522	1,6	0,21265	2,1	0,10140	0,4	0,05017	0,1

Tabela 4.7: Valores da Função do Termo de Interferência de Tsallis para $q = 1, 2$ calculados de acordo com a Equação (4.20).

A função $\chi_q(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\chi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%
0,05	0,00000	0,0	0,00155	29,2	0,00310	29,7	0,00619	29,5	0,01231	29,4	0,01830	29,4	0,02409	29,2	0,02963	29,0	0,05178	27,0	0,06086	16,6
0,10	0,00000	0,0	0,00591	29,0	0,01181	29,1	0,02350	29,0	0,04601	28,8	0,06661	28,3	0,08452	27,6	0,09914	26,6	0,11789	16,4	0,05560	6,7
0,15	0,00000	0,0	0,01270	28,8	0,02532	28,7	0,05005	28,5	0,09550	27,8	0,13249	26,7	0,15842	24,8	0,17233	22,3	0,12282	0,5	0,05203	2,6
0,20	0,00000	0,0	0,02154	28,2	0,04287	28,2	0,08400	27,9	0,15480	26,7	0,20272	24,4	0,22403	20,9	0,22131	15,9	0,11073	5,8	0,05107	1,2
0,25	0,00000	0,0	0,03214	27,8	0,06378	27,7	0,12361	27,2	0,21812	25,3	0,26618	21,5	0,26810	15,7	0,23903	8,4	0,10593	4,2	0,05066	0,7
0,30	0,00000	0,0	0,04421	27,4	0,08743	27,2	0,16727	26,5	0,28044	23,6	0,31567	18,0	0,28838	10,0	0,23579	1,6	0,10381	2,5	0,05044	0,5
0,35	0,00000	0,0	0,05748	26,9	0,11327	26,7	0,21351	25,8	0,33784	21,6	0,34853	14,0	0,29091	4,5	0,22611	2,7	0,10264	1,7	0,05031	0,4
0,40	0,00000	0,0	0,07176	26,5	0,14080	26,2	0,26103	25,0	0,38762	19,5	0,36596	9,9	0,28461	0,1	0,21812	4,3	0,10192	1,2	0,05023	0,3
0,45	0,00000	0,0	0,08682	26,0	0,16959	25,6	0,30873	24,1	0,42836	17,2	0,37163	6,1	0,27649	2,5	0,21298	4,2	0,10145	0,9	0,05018	0,2
0,50	0,00000	0,0	0,10251	25,5	0,19923	25,1	0,35565	23,2	0,45974	14,7	0,36998	2,8	0,26977	3,6	0,20965	3,5	0,10111	0,7	0,05014	0,2

Tabela 4.8: Valores da Função do Termo de Interferência de Tsallis para $q = 1, 3$ calculados de acordo com a Equação (4.20).

A função $\chi_q(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\chi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%
0,05	0,00000	0,0	0,00173	44,2	0,00345	44,4	0,00689	44,1	0,01370	44,1	0,02036	44,0	0,02679	43,6	0,03293	43,4	0,05707	40,0	0,06390	22,4
0,10	0,00000	0,0	0,00658	43,7	0,01313	43,5	0,02612	43,4	0,05108	43,0	0,07381	42,2	0,09339	40,9	0,10909	39,3	0,12371	22,1	0,05444	8,6
0,15	0,00000	0,0	0,01409	42,9	0,02810	42,8	0,05551	42,6	0,10565	41,4	0,14586	39,4	0,17306	36,4	0,18610	32,0	0,11966	2,1	0,05170	3,2
0,20	0,00000	0,0	0,02388	42,1	0,04750	42,0	0,09296	41,6	0,17045	39,5	0,22109	35,7	0,24044	29,7	0,23198	21,5	0,10853	7,7	0,05090	1,5
0,25	0,00000	0,0	0,03556	41,4	0,07053	41,2	0,13645	40,5	0,23879	37,1	0,28661	30,8	0,28088	21,2	0,24159	9,6	0,10488	5,1	0,05056	0,9
0,30	0,00000	0,0	0,04882	40,7	0,09651	40,4	0,18412	39,3	0,30485	34,3	0,33447	25,0	0,29388	12,1	0,23185	0,1	0,10316	3,1	0,05037	0,6
0,35	0,00000	0,0	0,06338	39,9	0,12478	39,6	0,23431	38,0	0,36418	31,1	0,36251	18,6	0,28943	3,9	0,22105	4,9	0,10219	2,1	0,05026	0,5
0,40	0,00000	0,0	0,07898	39,2	0,15480	38,7	0,28552	36,7	0,41388	27,6	0,37347	12,2	0,27960	1,6	0,21440	5,9	0,10159	1,5	0,05019	0,4
0,45	0,00000	0,0	0,09540	38,5	0,18605	37,8	0,33650	35,2	0,45261	23,8	0,37301	6,5	0,27130	4,3	0,21037	5,3	0,10119	1,2	0,05015	0,3
0,50	0,00000	0,0	0,11243	37,7	0,21811	36,9	0,38620	33,7	0,48043	19,9	0,36709	2,0	0,26560	5,1	0,20771	4,4	0,10091	0,9	0,05011	0,2

Tabela 4.9: Valores da Função do Termo de Interferência de Tsallis para $q = 1, 4$ calculados de acordo com a Equação (4.20).

A função $\chi_q(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\chi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%
0,05	0,00000	0,0	0,00190	58,3	0,00380	59,0	0,00759	58,8	0,01509	58,7	0,02242	58,6	0,02948	58,1	0,03619	57,6	0,06222	52,6	0,06607	26,5
0,10	0,00000	0,0	0,00723	57,9	0,01444	57,8	0,02872	57,7	0,05611	57,0	0,08092	55,9	0,10208	54,1	0,11873	51,6	0,12788	26,2	0,05372	9,8
0,15	0,00000	0,0	0,01548	57,0	0,03086	56,8	0,06092	56,4	0,11564	54,8	0,15885	51,9	0,18695	47,3	0,19859	40,9	0,11595	5,1	0,05146	3,7
0,20	0,00000	0,0	0,02618	55,8	0,05207	55,7	0,10178	55,0	0,18569	52,0	0,23844	46,3	0,25492	37,5	0,23972	25,6	0,10713	8,9	0,05078	1,8
0,25	0,00000	0,0	0,03893	54,8	0,07718	54,5	0,14903	53,4	0,25859	48,5	0,30499	39,2	0,29019	25,2	0,24058	9,1	0,10414	5,8	0,05048	1,1
0,30	0,00000	0,0	0,05336	53,7	0,10540	53,4	0,20054	51,7	0,32774	44,4	0,34991	30,8	0,29519	12,6	0,22681	2,2	0,10269	3,6	0,05032	0,7
0,35	0,00000	0,0	0,06915	52,7	0,13602	52,1	0,25443	49,9	0,38815	39,8	0,37198	21,7	0,28519	2,4	0,21724	6,5	0,10187	2,4	0,05023	0,5
0,40	0,00000	0,0	0,08603	51,6	0,16841	50,9	0,30902	47,9	0,43676	34,6	0,37618	13,0	0,27455	3,4	0,21187	7,0	0,10135	1,8	0,05017	0,4
0,45	0,00000	0,0	0,10373	50,6	0,20200	49,7	0,36291	45,9	0,47248	29,2	0,37060	5,8	0,26738	5,7	0,20856	6,2	0,10101	1,3	0,05012	0,3
0,50	0,00000	0,0	0,12205	49,5	0,23631	48,4	0,41494	43,7	0,49593	23,7	0,36239	0,7	0,26268	6,1	0,20634	5,0	0,10076	1,1	0,05009	0,3

Tabela 4.10: Valores da Função do Termo de Interferência de Tsallis para $q = 1, 5$ calculados de acordo com a Equação (4.20).

A função $\chi_q(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\chi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%	$\chi_q(x, \xi)$	%
0,05	0,00000	0,0	0,00208	73,3	0,00415	73,6	0,00829	73,4	0,01648	73,3	0,02446	73,0	0,03215	72,4	0,03944	71,7	0,06723	64,9	0,06736	29,0
0,10	0,00000	0,0	0,00789	72,3	0,01575	72,1	0,03131	71,9	0,06110	71,0	0,08794	69,4	0,11059	66,9	0,12807	63,5	0,13042	28,7	0,05321	10,7
0,15	0,00000	0,0	0,01685	70,9	0,03359	70,7	0,06628	70,2	0,12546	68,0	0,17147	63,9	0,20010	57,7	0,20979	48,8	0,11312	7,4	0,05128	4,0
0,20	0,00000	0,0	0,02846	69,4	0,05658	69,2	0,11048	68,2	0,20051	64,1	0,25480	56,4	0,26748	44,3	0,24464	28,1	0,10613	9,7	0,05069	2,0
0,25	0,00000	0,0	0,04225	68,0	0,08373	67,7	0,16136	66,1	0,27755	59,4	0,32135	46,7	0,29624	27,9	0,23707	7,5	0,10359	6,3	0,05042	1,2
0,30	0,00000	0,0	0,05782	66,6	0,11413	66,1	0,21654	63,8	0,34914	53,8	0,36212	35,3	0,29330	11,8	0,22247	4,1	0,10234	3,9	0,05028	0,8
0,35	0,00000	0,0	0,07481	65,2	0,14701	64,4	0,27389	61,3	0,40980	47,6	0,37742	23,5	0,28024	0,6	0,21453	7,7	0,10162	2,7	0,05020	0,6
0,40	0,00000	0,0	0,09291	63,7	0,18165	62,8	0,33156	58,7	0,45641	40,7	0,37528	12,7	0,27056	4,8	0,21004	7,8	0,10117	1,9	0,05014	0,5
0,45	0,00000	0,0	0,11184	62,3	0,21745	61,1	0,38800	55,9	0,48828	33,5	0,36640	4,6	0,26452	6,7	0,20722	6,8	0,10086	1,5	0,05011	0,3
0,50	0,00000	0,0	0,13137	60,9	0,25386	59,4	0,44195	53,1	0,50683	26,5	0,35778	0,6	0,26053	6,9	0,20531	5,5	0,10065	1,2	0,05008	0,3

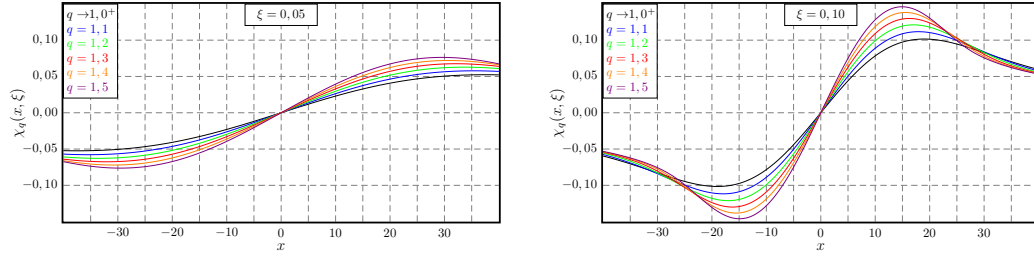


Figura 4.6: Comportamento da Função do Termo de Interferência de Tsallis variando q para $\xi = 0,05$ (à esquerda) e $\xi = 0,10$ (à direita).

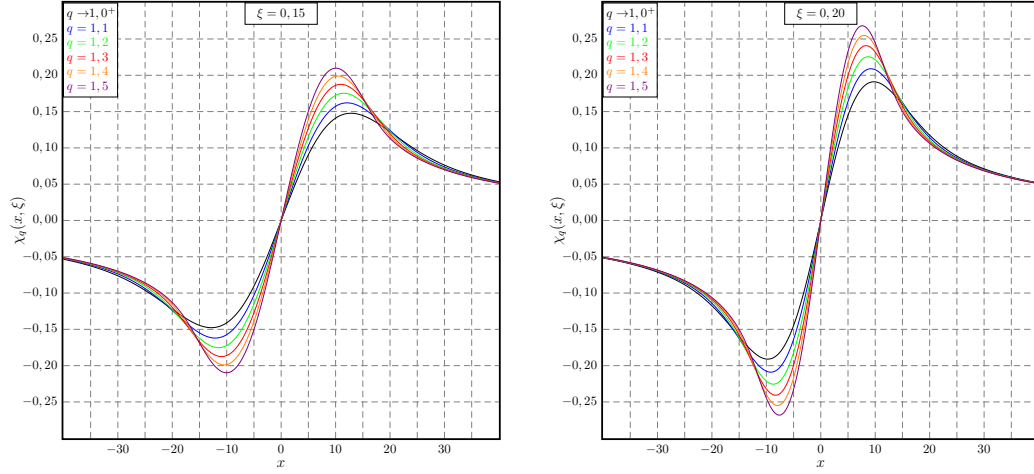


Figura 4.7: Comportamento da Função do Termo de Interferência de Tsallis variando q para $\xi = 0,15$ (à esquerda) e $\xi = 0,20$ (à direita).

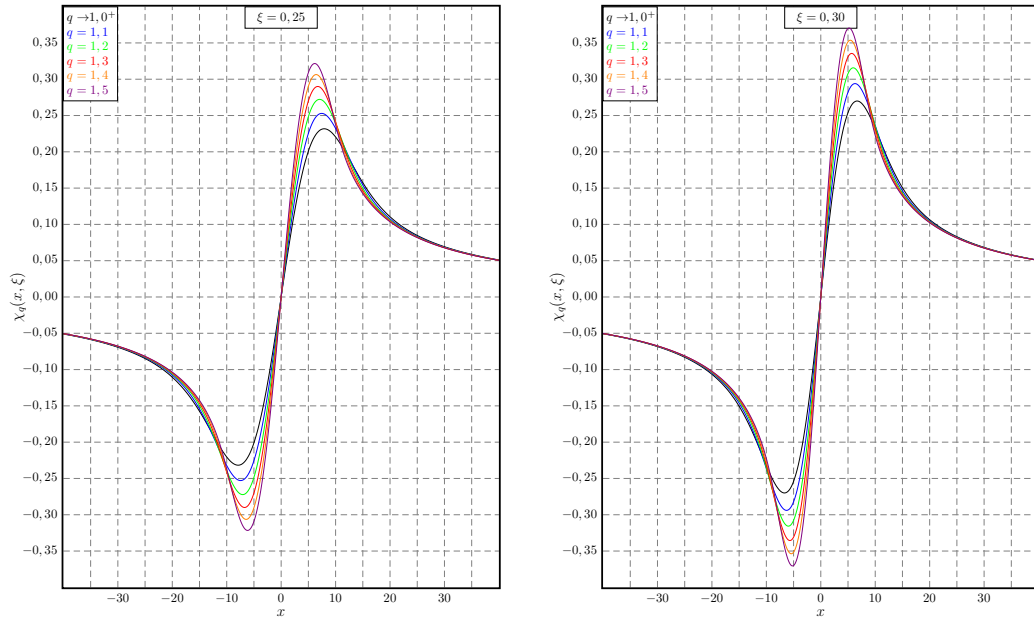


Figura 4.8: Comportamento da Função do Termo de Interferência de Tsallis variando q para $\xi = 0,25$ (à esquerda) e $\xi = 0,30$ (à direita).

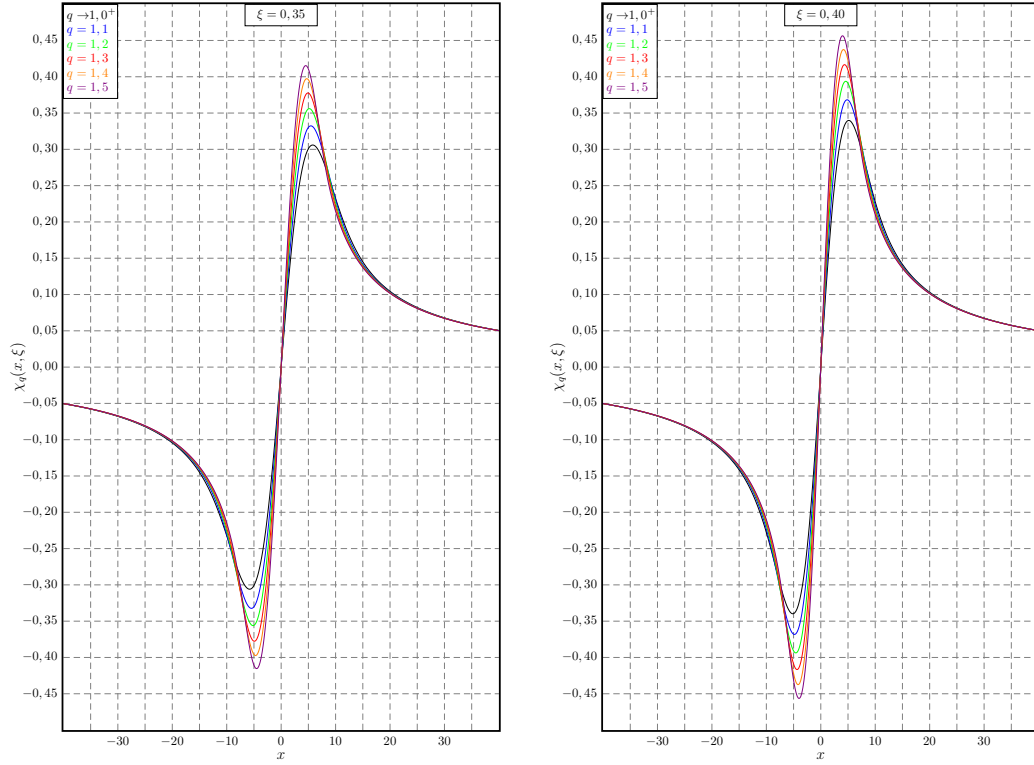


Figura 4.9: Comportamento da Função do Termo de Interferência de Tsallis variando q para $\xi = 0,35$ (à esquerda) e $\xi = 0,40$ (à direita).

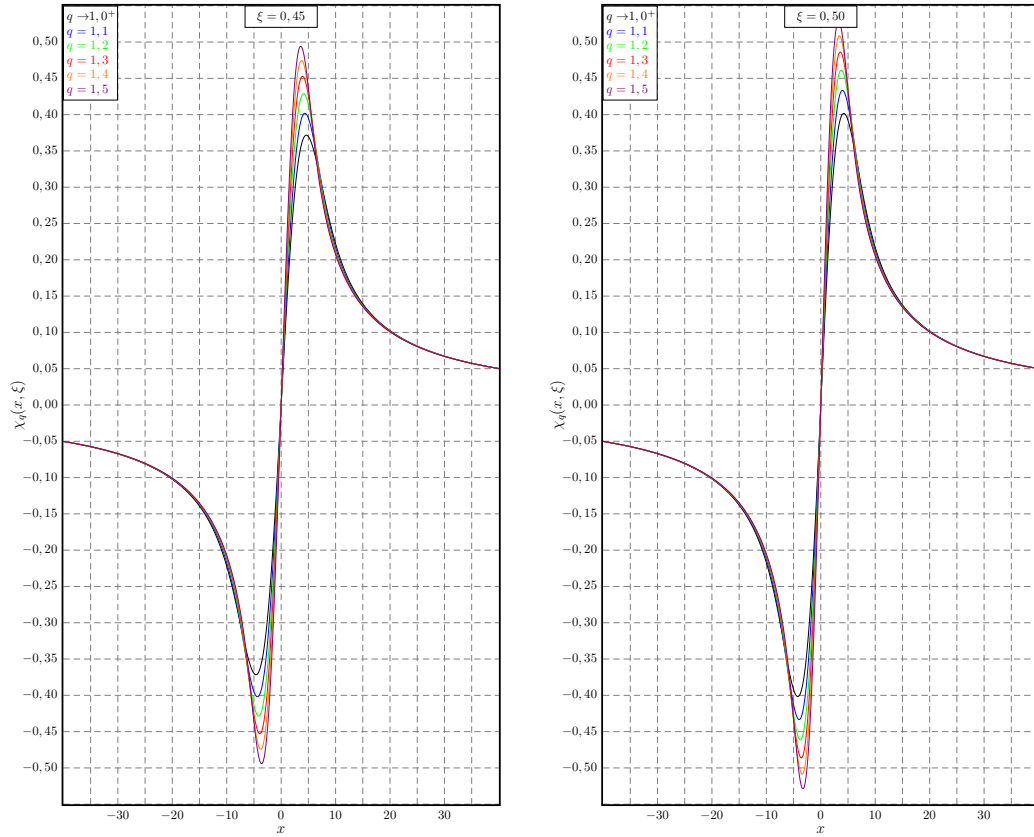


Figura 4.10: Comportamento da Função do Termo de Interferência de Tsallis variando q para $\xi = 0,45$ (à esquerda) e $\xi = 0,50$ (à direita).

Este capítulo aborda as consequências de se considerar o movimento aleatório dos núcleos alvo como dado pela distribuição não extensiva de Tsallis no estudo do Fenômeno de Alargamento Doppler. Neste contexto, novas Funções de Voigt deformadas batizadas como Função de Alargamento Doppler de Tsallis $\psi_q(x, \xi)$ e Função do Termo de Interferência de Tsallis $\chi_q(x, \xi)$, definidas pelas Equações (4.19) e (4.20) são obtidas. Estas funções dependem de um parâmetro de deformação q , e quando o limite de $q \rightarrow 1$ é tomado, se obtém como resultado as Funções de Voigt usuais, dadas pelas Equações (2.47) e (2.48). Estas novas expressões, que apresentam em sua forma integrais que, como no caso maxwelliano, não possuem soluções analíticas, foram avaliadas utilizando o método da quadratura de Gauss-Legendre, método numérico amplamente utilizado e bem estabelecido na literatura.

Analisando os gráficos apresentados, é possível perceber que, para uma dada ressonância, se o parâmetro ξ é mantido constante, o Efeito de Alargamento Doppler é deformado e depende do parâmetro q , e também é possível notar que, à medida que q aumenta, o fenômeno de Alargamento Doppler é atenuado, isto é, o parâmetro de deformação q suaviza o Efeito de Alargamento Doppler. A mudança de perfil para a Função de Alargamento Doppler pode afetar tanto a absorção ressonante quanto o espalhamento ressonante e, neste caso, o Termo de Interferência torna-se relevante. Também pode-se perceber, analisando as Equações (2.28) e (2.35), que a metodologia utilizada se aplica a qualquer distribuição isotrópica de velocidades, como a de Kaniadakis, por exemplo, que é tratada no capítulo 5.

Capítulo 5

Fenômeno de Alargamento Doppler com Estatística de Kaniadakis



Fachada do *Politecnico di Torino*, localizado em Turim, Itália

Imagem extraída de <http://www.studyintorino.it>. Acesso em 30 de abr de 2019.

5.1 Expressão geral da Função de Alargamento Doppler e da Função do Termo de Interferência com estatística de Kaniadakis

Considera-se, agora, núcleos alvo cujas velocidades obedecem a distribuição de Kaniadakis, definida pelas Equações (1.106), (1.98) e (1.97) para o caso onde $n = 3$. Segue-se, basicamente, os mesmos passos do capítulo 2. Como tal distribuição é isotrópica, sua formulação matemática preserva a propriedade de paridade na variável V , e as Equações (2.28) e (2.35) podem ser utilizadas. Assim, tem-se que:

$$\Psi_{\kappa}(x, \xi) = \pi \sqrt{\frac{2k_B T}{M}} A_{\kappa} \xi \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{1}{1+y^2} \int_{v(x)-v_r(y)}^{v(x)+v_r(y)} V \exp_{\kappa} \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) dV dy. \quad (5.1)$$

$$X_{\kappa}(x, \xi) = 2\pi \sqrt{\frac{2k_B T}{M}} A_{\kappa} \xi \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{y}{1+y^2} \int_{v(x)-v_r(y)}^{v(x)+v_r(y)} V \exp_{\kappa} \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) dV dy. \quad (5.2)$$

Com o resultado apresentado nas Equações (5.1) e (5.2), fica evidente a necessidade de determinar a integral da função \exp_{κ} :

$$\int \exp_{\kappa}(\alpha) d\alpha = \int \left(\sqrt{\kappa^2 \alpha^2 + 1} + \kappa \alpha \right)^{1/\kappa} d\alpha. \quad (5.3)$$

Inicialmente, faz-se a seguinte substituição trigonométrica:

$$\kappa \alpha = \tan \theta \rightarrow d\alpha = \frac{1}{\kappa} \sec^2 \theta d\theta, \quad (5.4)$$

e se obtém o resultado abaixo:

$$\int \exp_{\kappa}(\alpha) d\alpha = \frac{1}{\kappa} \int (\sec \theta + \tan \theta)^{1/\kappa} \sec^2 \theta d\theta. \quad (5.5)$$

Neste ponto, faz-se a chamada substituição do arco-metade [48]:

$$z = \tan \left(\frac{\theta}{2} \right), \quad (5.6)$$

$$\tan \theta = \frac{2z}{1-z^2}, \quad (5.7)$$

$$\sec \theta = \frac{1+z^2}{1-z^2}, \quad (5.8)$$

$$d\theta = \frac{2dz}{1+z^2}. \quad (5.9)$$

Com a substituição das Equações (5.7), (5.8) e (5.9) na Equação (5.5), obtém-se:

$$\begin{aligned}
\int \exp_{\kappa}(\alpha) d\alpha &= \frac{1}{\kappa} \int \left[\frac{1+z^2}{1-z^2} + \frac{2z}{1-z^2} \right]^{1/\kappa} \left(\frac{1+z^2}{1-z^2} \right)^2 \frac{2dz}{1+z^2} = \\
&= \frac{2}{\kappa} \int \left[\frac{(1+z)^2}{(1-z)(1+z)} \right]^{1/\kappa} \left[\frac{(1+z^2)^2}{[(1+z)(1-z)]^2} \right] \frac{dz}{1+z^2} = \\
&= \frac{2}{\kappa} \int \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa} \left[\frac{(1+z^2)}{[(1+z)(1-z)]^2} \right] dz = \\
&= \frac{2}{\kappa} \int \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa} \left[\frac{1+2z+z^2-2z}{(1-z)^2(1+z)^2} \right] dz = \\
&= \frac{2}{\kappa} \int \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa} \left[\frac{(1+z)^2-2z}{(1-z)^2(1+z)^2} \right] dz = \\
&= \frac{2}{\kappa} \int \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa} \frac{dz}{(1-z)^2} + \\
&\quad - \frac{4}{\kappa} \int \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa} \frac{zdz}{(1-z)^2(1+z)^2}. \tag{5.10}
\end{aligned}$$

A primeira integral que aparece na Equação (5.10) resolve-se por meio de uma substituição simples, do tipo:

$$w = \frac{1+z}{1-z} \rightarrow dw = \frac{2dz}{(1-z)^2}, \tag{5.11}$$

e se obtém:

$$\begin{aligned}
\int \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa} \frac{dz}{(1-z)^2} &= \frac{1}{2} \int w^{1/\kappa} dw = \frac{\kappa w^{1/\kappa+1}}{2(\kappa+1)} + C = \\
&= \frac{\kappa}{2(\kappa+1)} \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa+1} + C. \tag{5.12}
\end{aligned}$$

Já a outra integral que aparece na Equação (5.10), resolve-se fazendo uma integração por partes, do seguinte modo:

$$\begin{aligned}
dv &= \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa} \frac{dz}{(1-z)^2} \Rightarrow v = \frac{\kappa}{2(\kappa+1)} \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa+1} \\
u &= \frac{z}{(1+z)^2} \Rightarrow du = \frac{1-z}{(1+z)^3} dz, \tag{5.13}
\end{aligned}$$

onde foi utilizada a Equação (5.12). Com a integração por partes, se obtém:

$$\int \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa} \frac{zdz}{(1-z)^2(1+z)^2} = \frac{\kappa}{2(\kappa+1)} \left\{ \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa+1} \left[\frac{z}{(1+z)^2} \right] + \right. \\ \left. - \int \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa+1} \left[\frac{1-z}{(1+z)^3} \right] dz \right\}. \quad (5.14)$$

A integral que resta na Equação (5.14) resolve-se como segue:

$$\int \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa+1} \left[\frac{1-z}{(1+z)^3} \right] \frac{(1-z)^2}{(1-z)^2} dz = \\ = \int \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa+1} \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{-3} \frac{dz}{(1-z)^2} = \\ = \int \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa-2} \frac{dz}{(1-z)^2}, \quad (5.15)$$

já o resultado da Equação (5.15) resolve-se com a substituição apresentada na Equação (5.11):

$$\int \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa+1} \left[\frac{1-z}{(1+z)^3} \right] dz = \\ = \frac{1}{2} \int w^{1/\kappa-2} dw = -\frac{\kappa}{2(\kappa-1)} w^{1/\kappa-1} + C = \\ = -\frac{\kappa}{2(\kappa-1)} \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa-1} + C. \quad (5.16)$$

Agora, com a substituição da Equação (5.16) na (5.14), chega-se ao seguinte:

$$\int \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa} \frac{zdz}{(1-z)^2(1+z)^2} = \frac{\kappa}{2(\kappa+1)} \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa} \times \\ \times \left\{ \left(\frac{z}{1-z^2} \right) + \frac{\kappa}{2(\kappa-1)} \left(\frac{1-z}{1+z} \right) \right\} + C, \quad (5.17)$$

e, substituindo as Equações (5.12) e (5.17) na Equação (5.10), chega-se a:

$$\int \exp_{\kappa}(\alpha) d\alpha = \frac{1}{\kappa+1} \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa} \times \\ \times \left[\left(\frac{1+z}{1-z} \right) - \left(\frac{2z}{1-z^2} \right) - \left(\frac{\kappa}{\kappa-1} \right) \left(\frac{1-z}{1+z} \right) \right]. \quad (5.18)$$

Na Equação (5.18), escreve-se a expressão entre colchetes como uma única fração:

$$\begin{aligned}
\int \exp_{\kappa}(\alpha) d\alpha &= \frac{1}{\kappa + 1} \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa} \times \\
&\times \left[\frac{(1+z)^2(\kappa-1) - 2z(\kappa-1) - \kappa(1-z)^2}{(1-z^2)(\kappa-1)} \right] = \\
&= \frac{1}{\kappa + 1} \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa} \times \left\{ \frac{[(1+z)^2 - 2z](\kappa-1) - \kappa(1-z)^2}{(1-z^2)(\kappa-1)} \right\} = \\
&= \frac{1}{\kappa^2 - 1} \left(\frac{1+z}{1-z} \right)^{1/\kappa} \left[\kappa \left(\frac{2z}{1-z^2} \right) - \left(\frac{1+z^2}{1-z^2} \right) \right]. \quad (5.19)
\end{aligned}$$

O termo em colchetes na Equação (5.19), com a substituição das Equações (5.7) e (5.8), fica:

$$\kappa \left(\frac{2z}{1-z^2} \right) - \left(\frac{1+z^2}{1-z^2} \right) = \kappa \tan \theta - \sec \theta, \quad (5.20)$$

e o termo restante em z , também com uso das Equações (5.7) e (5.8) fica:

$$\frac{1+z}{1-z} = \frac{(1+z)^2}{(1+z)(1-z)} = \frac{1+2z+z^2}{1-z^2} = \frac{1+z^2}{1-z^2} + \frac{2z}{1-z^2} = \sec \theta + \tan \theta. \quad (5.21)$$

A substituição das Equações (5.20) e (5.21) na Equação (5.19) resulta em:

$$\begin{aligned}
\int \exp_{\kappa}(\alpha) d\alpha &= \left(\frac{\kappa \tan \theta - \sec \theta}{\kappa^2 - 1} \right) (\sec \theta + \tan \theta)^{1/\kappa} + C = \\
&= \left(\frac{\kappa \tan \theta - \sqrt{\tan^2 \theta + 1}}{\kappa^2 - 1} \right) (\sqrt{\tan^2 \theta + 1} + \tan \theta)^{1/\kappa} + C. \quad (5.22)
\end{aligned}$$

Finalmente, com a substituição da Equação (5.4) na Equação (5.22), chega-se ao seguinte resultado:

$$\int \exp_{\kappa}(\alpha) d\alpha = \left(\frac{\kappa^2 \alpha - \sqrt{\kappa^2 \alpha^2 + 1}}{\kappa^2 - 1} \right) (\sqrt{\kappa^2 \alpha^2 + 1} + \kappa^2 \alpha)^{1/\kappa} + C. \quad (5.23)$$

Com uso da Equação (1.98), a Equação (5.23) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\int \exp_{\kappa}(\alpha) d\alpha = \left(\frac{\kappa^2 \alpha - \sqrt{\kappa^2 \alpha^2 + 1}}{\kappa^2 - 1} \right) \exp_{\kappa}(\alpha) + C = \text{iexp}_{\kappa}(\alpha) + C, \quad (5.24)$$

onde define-se a função iexp_{κ} pela expressão:

$$\text{iexp}_{\kappa}(\alpha) = \left(\frac{\kappa^2 \alpha - \sqrt{\kappa^2 \alpha^2 + 1}}{\kappa^2 - 1} \right) \exp_{\kappa}(\alpha). \quad (5.25)$$

O limite $\kappa \rightarrow 0$, levando em conta a Equação (1.133), torna-se trivial:

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} \text{iexp}_\kappa(\alpha) = e^\alpha. \quad (5.26)$$

Após uma substituição simples do tipo $u = -V^2/2v_{th}^2$, a integral na variável V que aparece nas Equações (5.1) e (5.2) fica:

$$\int_{v(x)-v_r(y)}^{v(x)+v_r(y)} V \exp_\kappa \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) dV = \text{iexp}_\kappa \left[-\frac{(v(x) - v_r(y))^2}{2v_{th}^2} \right] + \\ - \text{iexp}_\kappa \left[-\frac{(v(x) + v_r(y))^2}{2v_{th}^2} \right] dV. \quad (5.27)$$

Assim, substituindo a Equação (5.27) nas Equações (5.1) e (5.2) se obtém, respectivamente:

$$\Psi_\kappa(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} B_\kappa \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{1}{1+y^2} \left\{ \text{iexp}_\kappa \left[-\frac{(v(x) - v_r(y))^2}{2v_{th}^2} \right] + \right. \\ \left. - \text{iexp}_\kappa \left[-\frac{(v(x) + v_r(y))^2}{2v_{th}^2} \right] \right\} dy, \quad (5.28)$$

$$X_\kappa(x, \xi) = \frac{\xi}{\sqrt{\pi}} B_\kappa \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{y}{1+y^2} \left\{ \text{iexp}_\kappa \left[-\frac{(v(x) - v_r(y))^2}{2v_{th}^2} \right] + \right. \\ \left. - \text{iexp}_\kappa \left[-\frac{(v(x) + v_r(y))^2}{2v_{th}^2} \right] \right\} dy, \quad (5.29)$$

que podem ser chamadas de *Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis* e *Função do Termo de Interferência de Kaniadakis*. A constante B_κ que aparece nas Equações (5.28) e (5.29) é definida com auxílio da Equação (1.106), do seguinte modo:

$$B_\kappa = A_\kappa \left(\frac{2\pi k_B T}{M} \right)^{3/2} = (2|\kappa|)^{3/2} \left(1 + \frac{3}{2}|\kappa| \right) \frac{\Gamma(1/2|\kappa| + 3/4)}{\Gamma(1/2|\kappa| - 3/4)}. \quad (5.30)$$

Com as Equações (1.129) e (5.26), percebe-se facilmente que no limite $\kappa \rightarrow 0$, as Equações (5.28) e (5.29) reproduzem as Equações (2.29) e (2.36).

5.2 Funções de Voigt com estatística de Kaniadakis

Nesta seção, são obtidas as expressões para a Função de Alargamento Doppler e a Função do Termo de Interferência de Kaniadakis considerando as aproximações

de Bethe e Placzek. Pode-se chamar estas novas Funções de *Funções de Voigt κ -deformadas* ou *Funções de Voigt com estatística de Kaniadakis*. A primeira das aproximações, apresentada pela Equação (2.37), consiste em desprezar o segundo termo que aparece nas Equações (5.28) e (5.29). A segunda delas, apresentada na Equação (2.38), estende o limite de integração para $-\infty$ e a terceira, dada pela Equação (2.39), pode ser aplicada usando a Equação (2.46) no argumento da iexp_κ que resta nas Equações (5.28) e (5.29). Após estes procedimentos, chega-se aos seguintes resultados:

$$\Psi_\kappa(x, \xi) \approx \psi_\kappa(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} B_\kappa \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1+y^2} \text{iexp}_\kappa \left[-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2 \right] dy, \quad (5.31)$$

$$X_\kappa(x, \xi) \approx \chi_\kappa(x, \xi) = \frac{\xi}{\sqrt{\pi}} B_\kappa \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y}{1+y^2} \text{iexp}_\kappa \left[-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2 \right] dy. \quad (5.32)$$

5.3 Resultados

Nesta seção os resultados obtidos para a Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis, $\psi_\kappa(x, \xi)$ assim como para a Função do Termo de Interferência de Kaniadakis $\chi_\kappa(x, \xi)$ deduzidos nesta tese são reportados. São apresentados resultados tanto na forma de tabelas como na forma de gráficos. Assim, é possível fazer uma análise quantitativa e também qualitativa dos resultados obtidos. Para avaliar as integrais nas Equações (5.31) e (5.32), utiliza-se o método de quadratura de Gauss-Legendre [66], cujos pontos de Legendre x_i utilizados e seus respectivos pesos encontram-se na Tabela B.1, localizada no Apêndice B.

O parâmetro de deformação κ está sujeito à condição $0 < \kappa < 2/n$. Assim, para estudar a influência de algum desvio do comportamento maxwelliano, o intervalo do caso não deformado $\kappa = 0$ até $\kappa = 0,5$, com um incremento de 0,1 foi o considerado. Nesta faixa de valores é possível estudar a influência de se utilizar a distribuição de Kaniadakis no Fenômeno de Alargamento Doppler.

Nas Tabelas 5.1 a 5.5 podem ser encontrados, no intervalo escolhido para o parâmetro κ , os valores para a Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis, assim como seus respectivos desvios dos valores da Função de Alargamento Doppler usual mostrados na Tabela 2.1. Estes valores foram calculados usando as Equações (5.31) e (B.2). As Figuras 5.1 a 5.5 ilustram o comportamento da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis definida pela Equação (5.31) para diferentes valores do parâmetro κ , bem como a Função de Alargamento Doppler maxwelliana dada pela Equação (2.47) considerando diversos valores para o parâmetro ξ .

Nas Tabelas 5.6 a 5.10, são apresentados os resultados para a Função do Termo de Interferência de Kaniadakis e seus respectivos desvios percentuais relativos aos

valores da Função do Termo de Interferência usual mostrados na Tabela 2.3. Finalmente, nas Figuras 5.6 a 5.10 estão representadas a Função do Termo de Interferência de Kaniadakis definido pela Equação (5.32), juntamente com a Função de Termo de Interferência maxwelliana, dada pela Equação (2.48).

Tabela 5.1: Valores da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis para $\kappa = 0, 1$ calculados de acordo com a Equação (5.31).

A função $\psi_{\kappa}(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\psi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%
0,05	0,04258	1,2	0,04257	1,2	0,04255	1,2	0,04248	1,2	0,04217	1,2	0,04167	1,2	0,04097	1,2	0,04010	1,1	0,03349	0,9	0,01645	0,4
0,10	0,08286	1,2	0,08281	1,2	0,08267	1,2	0,08209	1,2	0,07982	1,1	0,07618	1,1	0,07136	1,0	0,06563	0,9	0,03302	0,3	0,00296	13,0
0,15	0,12099	1,1	0,12084	1,1	0,12037	1,1	0,11854	1,1	0,11149	1,1	0,10070	0,9	0,08739	0,7	0,07294	0,5	0,01760	3,8	0,00085	6,2
0,20	0,15710	1,1	0,15676	1,1	0,15572	1,1	0,15165	1,1	0,13644	1,0	0,11455	0,7	0,08996	0,3	0,06632	0,3	0,00776	8,8	0,00070	0,0
0,25	0,19133	1,1	0,19068	1,1	0,18877	1,1	0,18132	1,1	0,15451	0,9	0,11879	0,5	0,08296	0,2	0,05326	1,4	0,00427	8,4	0,00067	0,0
0,30	0,22377	1,1	0,22272	1,1	0,21960	1,1	0,20758	1,0	0,16609	0,7	0,11558	0,1	0,07114	1,0	0,03992	2,9	0,00326	3,8	0,00065	0,0
0,35	0,25455	1,1	0,25297	1,1	0,24829	1,0	0,23048	1,0	0,17193	0,5	0,10748	0,3	0,05839	2,0	0,02938	4,3	0,00294	1,7	0,00065	1,6
0,40	0,28377	1,1	0,28153	1,0	0,27493	1,0	0,25016	0,9	0,17297	0,4	0,09686	0,9	0,04705	3,0	0,02221	5,3	0,00280	1,1	0,00064	0,0
0,45	0,31151	1,0	0,30849	1,0	0,29961	1,0	0,26681	0,8	0,17026	0,2	0,08560	1,4	0,03810	3,8	0,01775	5,2	0,00272	0,7	0,00064	0,0
0,50	0,33788	1,0	0,33394	1,0	0,32244	1,0	0,28062	0,8	0,16483	0,1	0,07494	2,0	0,03155	4,3	0,01510	4,4	0,00267	0,4	0,00063	0,0

Tabela 5.2: Valores da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis para $\kappa = 0, 2$ calculados de acordo com a Equação (5.31).

A função $\psi_\kappa(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\psi(x, \xi)$.															
	$x = 0$			$x = 0, 5$			$x = 1$			$x = 2$			$x = 4$		
ξ	$\psi_\kappa(x, \xi)$	%		$\psi_\kappa(x, \xi)$	%		$\psi_\kappa(x, \xi)$	%		$\psi_\kappa(x, \xi)$	%		$\psi_\kappa(x, \xi)$	%	
0,05	0,04098	4,9		0,04097	4,9		0,04095	4,9		0,04088	4,9		0,04060	4,9	
0,10	0,07979	4,8		0,07974	4,8		0,07961	4,8		0,07907	4,8		0,07695	4,7	
0,15	0,11657	4,8		0,11643	4,7		0,11600	4,7		0,11429	4,7		0,10771	4,4	
0,20	0,15145	4,7		0,15113	4,7		0,15016	4,6		0,14636	4,5		0,13217	4,1	
0,25	0,18455	4,6		0,18395	4,6		0,18217	4,6		0,17522	4,4		0,15018	3,6	
0,30	0,21597	4,5		0,21499	4,5		0,21208	4,5		0,20085	4,2		0,16211	3,1	
0,35	0,24581	4,5		0,24434	4,4		0,23997	4,4		0,22334	4,0		0,16862	2,5	
0,40	0,27418	4,4		0,27209	4,4		0,26592	4,3		0,24279	3,8		0,17059	1,7	
0,45	0,30115	4,3		0,29833	4,3		0,29003	4,2		0,25938	3,6		0,16899	0,9	
0,50	0,32681	4,3		0,32313	4,2		0,31238	4,1		0,27330	3,4		0,16475	0,0	

Tabela 5.3: Valores da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis para $\kappa = 0,3$ calculados de acordo com a Equação (5.31).

A função $\psi_{\kappa}(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\psi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%
0,05	0,03803	11,7	0,03803	11,7	0,03801	11,7	0,03795	11,7	0,03770	11,6	0,03728	11,6	0,03671	11,4	0,03600	11,2	0,03058	9,5	0,01655	1,0
0,10	0,07413	11,6	0,07409	11,6	0,07397	11,6	0,07350	11,5	0,07164	11,3	0,06865	10,8	0,06470	10,2	0,06000	9,4	0,03312	0,6	0,00586	123,7
0,15	0,10842	11,4	0,10829	11,4	0,10791	11,4	0,10640	11,3	0,10062	10,7	0,09176	9,7	0,08083	8,2	0,06894	5,9	0,02208	30,3	0,00221	176,3
0,20	0,14100	11,3	0,14071	11,2	0,13986	11,2	0,13652	11,0	0,12403	10,0	0,10604	8,1	0,08577	5,0	0,06616	0,0	0,01319	85,0	0,00125	78,6
0,25	0,17197	11,1	0,17145	11,1	0,16988	11,0	0,16376	10,6	0,14173	9,1	0,11231	5,9	0,08258	0,2	0,05745	9,4	0,00840	113,2	0,00093	38,8
0,30	0,20145	11,0	0,20059	10,9	0,19802	10,8	0,18814	10,3	0,15401	7,9	0,11225	3,0	0,07489	6,3	0,04747	22,3	0,00597	90,1	0,00079	21,5
0,35	0,22951	10,8	0,22821	10,7	0,22436	10,6	0,20971	9,9	0,16147	6,6	0,10786	0,7	0,06568	14,7	0,03864	37,2	0,00468	61,9	0,00073	14,1
0,40	0,25623	10,7	0,25439	10,6	0,24896	10,4	0,22858	9,5	0,16484	5,0	0,10096	5,1	0,05676	24,2	0,03169	50,2	0,00396	43,0	0,00070	9,4
0,45	0,28170	10,5	0,27922	10,4	0,27191	10,1	0,24489	9,0	0,16496	3,3	0,09298	10,2	0,04899	33,5	0,02650	57,1	0,00352	30,4	0,00067	4,7
0,50	0,30599	10,4	0,30275	10,3	0,29328	9,9	0,25881	8,5	0,16261	1,3	0,08490	15,6	0,04259	40,8	0,02269	56,9	0,00325	22,2	0,00066	4,8

Tabela 5.4: Valores da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis para $\kappa = 0,4$ calculados de acordo com a Equação (5.31).

A função $\psi_{\kappa}(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\psi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%
0,05	0,03324	22,9	0,03324	22,8	0,03323	22,8	0,03317	22,8	0,03297	22,7	0,03264	22,6	0,03218	22,4	0,03160	22,1	0,02724	19,4	0,01589	3,1
0,10	0,06489	22,6	0,06486	22,6	0,06476	22,6	0,06438	22,5	0,06288	22,1	0,06047	21,5	0,05729	20,5	0,05350	19,2	0,03174	3,6	0,00818	212,2
0,15	0,09504	22,3	0,09494	22,3	0,09463	22,3	0,09342	22,1	0,08875	21,2	0,08161	19,7	0,07279	17,3	0,06318	13,8	0,02448	44,4	0,00434	442,5
0,20	0,12378	22,1	0,12355	22,1	0,12286	22,0	0,12016	21,6	0,11009	20,1	0,09557	17,2	0,07917	12,3	0,06322	4,4	0,01749	145,3	0,00278	297,1
0,25	0,15119	21,9	0,15077	21,8	0,14950	21,7	0,14456	21,1	0,12678	18,6	0,10298	13,7	0,07880	4,8	0,05806	10,5	0,01292	227,9	0,00203	203,0
0,30	0,17735	21,6	0,17666	21,5	0,17459	21,3	0,16661	20,5	0,13904	16,9	0,10516	9,1	0,07447	5,7	0,05123	32,0	0,01006	220,4	0,00161	147,7
0,35	0,20234	21,4	0,20129	21,3	0,19819	21,0	0,18636	19,9	0,14733	14,8	0,10363	3,3	0,06842	19,5	0,04464	58,5	0,00820	183,7	0,00135	110,9
0,40	0,22622	21,1	0,22473	21,0	0,22035	20,7	0,20388	19,2	0,15223	12,3	0,09979	3,9	0,06209	35,9	0,03899	84,8	0,00695	150,9	0,00119	85,9
0,45	0,24905	20,9	0,24704	20,7	0,24114	20,3	0,21929	18,5	0,15437	9,5	0,09475	12,3	0,05618	53,1	0,03437	103,7	0,00606	124,4	0,00107	67,2
0,50	0,27089	20,6	0,26827	20,5	0,26061	20,0	0,23272	17,7	0,15438	6,3	0,08925	21,5	0,05097	68,5	0,03065	112,0	0,00542	103,8	0,00099	57,1

Tabela 5.5: Valores da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis para $\kappa = 0,5$ calculados de acordo com a Equação (5.31).

A função $\psi_{\kappa}(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\psi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\psi_{\kappa}(x, \xi)$	%
0,05	0,02562	40,5	0,02562	40,5	0,02561	40,5	0,02558	40,5	0,02544	40,4	0,02521	40,2	0,02489	40,0	0,02449	39,6	0,02150	36,4	0,01367	16,6
0,10	0,05011	40,2	0,05009	40,2	0,05003	40,2	0,04976	40,1	0,04873	39,6	0,04708	38,9	0,04489	37,7	0,04228	36,2	0,02726	17,2	0,00983	275,2
0,15	0,07354	39,9	0,07347	39,9	0,07326	39,8	0,07243	39,6	0,06922	38,6	0,06431	36,7	0,05824	33,9	0,05161	29,6	0,02427	43,2	0,00701	776,2
0,20	0,09597	39,6	0,09582	39,6	0,09534	39,5	0,09349	39,0	0,08656	37,2	0,07656	33,7	0,06524	27,7	0,05416	18,1	0,02034	185,3	0,00546	680,0
0,25	0,11746	39,3	0,11716	39,2	0,11629	39,1	0,11290	38,4	0,10065	35,4	0,08423	29,4	0,06744	18,5	0,05278	0,5	0,01727	338,3	0,00451	573,1
0,30	0,13805	39,0	0,13757	38,9	0,13615	38,7	0,13066	37,7	0,11165	33,3	0,08819	23,8	0,06663	5,4	0,04976	28,2	0,01500	377,7	0,00387	495,4
0,35	0,15780	38,7	0,15708	38,6	0,15494	38,2	0,14679	36,9	0,11985	30,7	0,08943	16,5	0,06427	12,2	0,04636	64,6	0,01331	360,6	0,00341	432,8
0,40	0,17676	38,4	0,17574	38,2	0,17271	37,8	0,16136	36,1	0,12564	27,6	0,08884	7,5	0,06128	34,1	0,04312	104,4	0,01201	333,6	0,00306	378,1
0,45	0,19496	38,1	0,19358	37,9	0,18951	37,4	0,17444	35,2	0,12943	24,1	0,08715	3,3	0,05819	58,6	0,04023	138,5	0,01098	306,7	0,00279	335,9
0,50	0,21246	37,8	0,21065	37,6	0,20537	36,9	0,18611	34,2	0,13162	20,1	0,08486	15,5	0,05524	82,6	0,03771	160,8	0,01016	282,0	0,00258	309,5

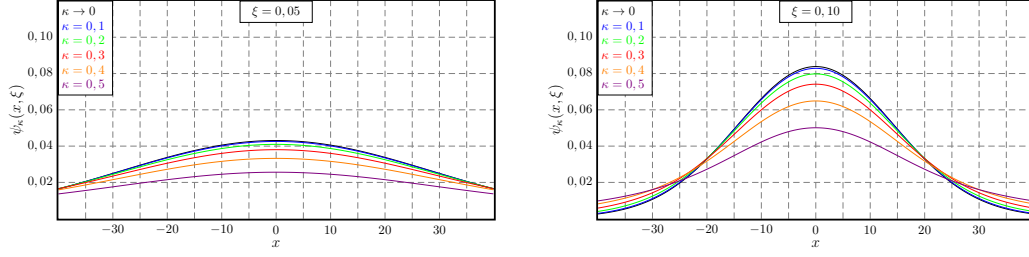


Figura 5.1: Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,05$ (à esquerda) e $\xi = 0,10$ (à direita).

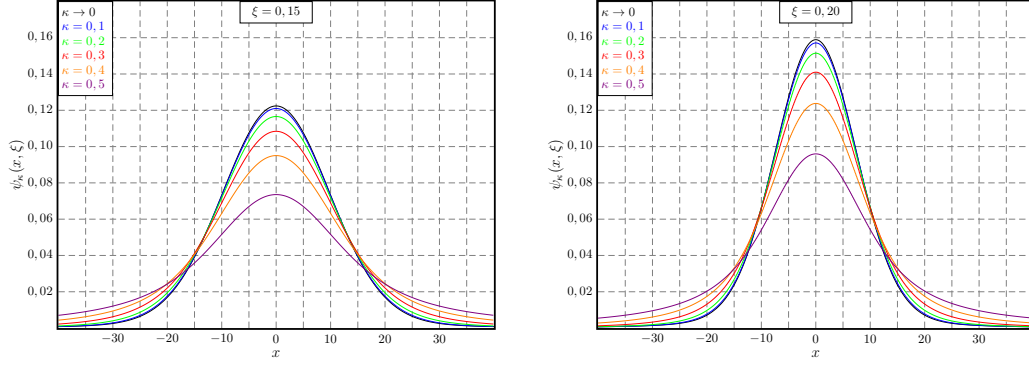


Figura 5.2: Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,15$ (à esquerda) e $\xi = 0,20$ (à direita).

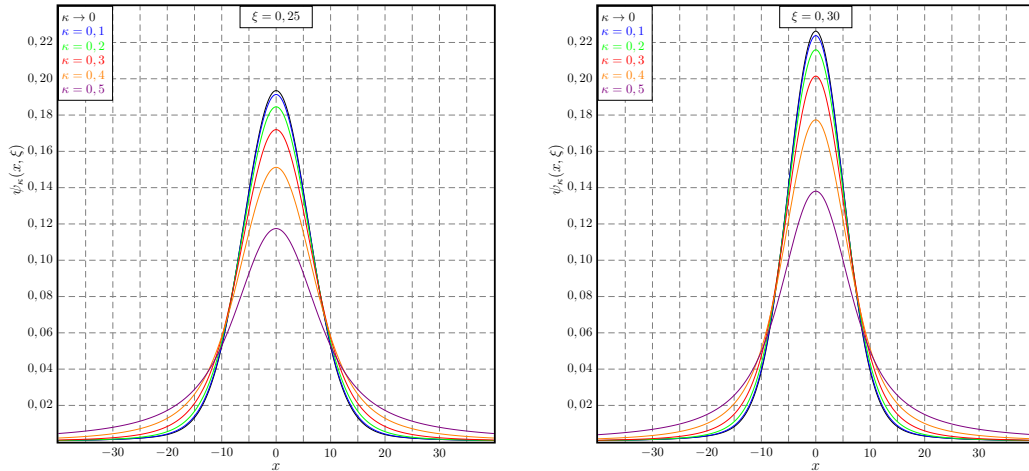


Figura 5.3: Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,25$ (à esquerda) e $\xi = 0,30$ (à direita).

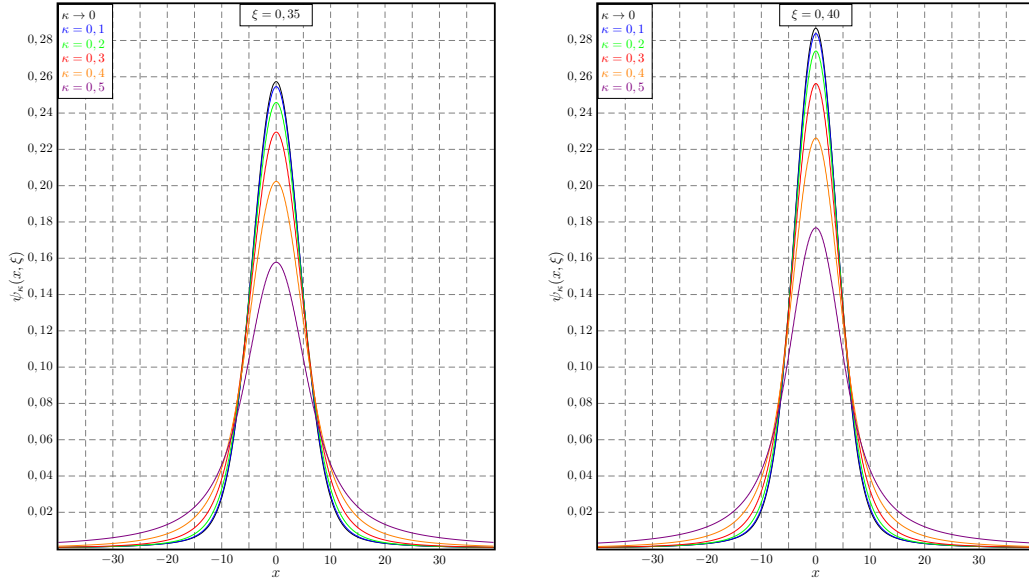


Figura 5.4: Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,35$ (à esquerda) e $\xi = 0,40$ (à direita).

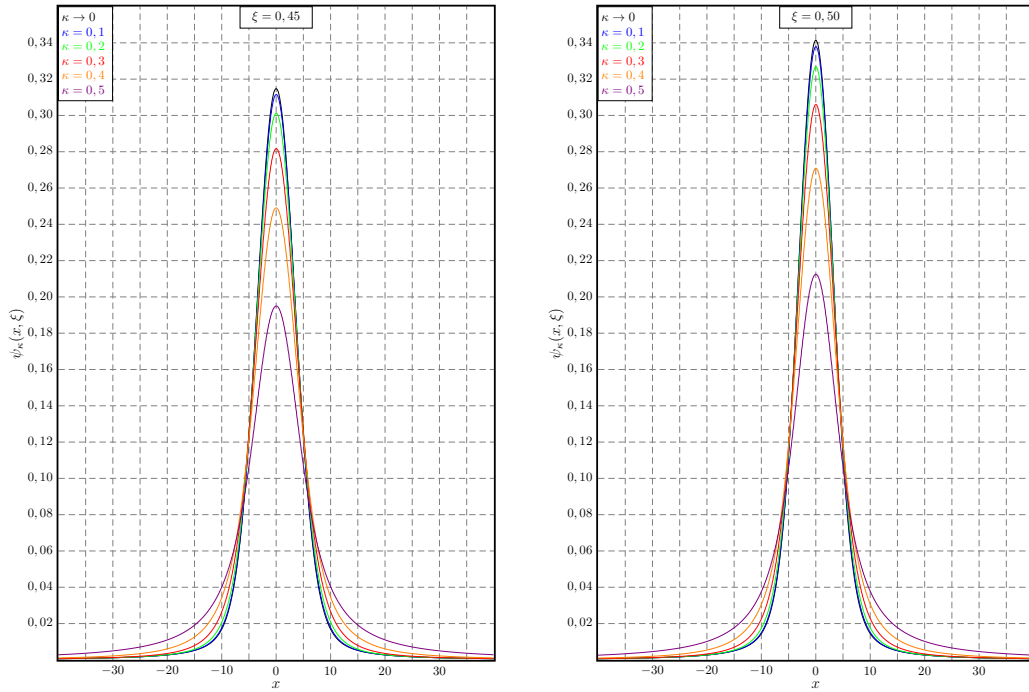


Figura 5.5: Comportamento da Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,45$ (à esquerda) e $\xi = 0,50$ (à direita).

Tabela 5.6: Valores da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis para $\kappa = 0,1$ calculados de acordo com a Equação (5.32).

A função $\chi_{\kappa}(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\chi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%
0,05	0,00000	0,0	0,00117	2,5	0,00235	1,7	0,00469	1,9	0,00933	1,9	0,01388	1,8	0,01830	1,9	0,02255	1,8	0,04003	1,8	0,05142	1,5
0,10	0,00000	0,0	0,00449	2,0	0,00898	1,9	0,01787	1,9	0,03507	1,8	0,05097	1,8	0,06506	1,8	0,07693	1,8	0,09982	1,5	0,05968	0,2
0,15	0,00000	0,0	0,00968	1,8	0,01932	1,8	0,03823	1,8	0,07334	1,8	0,10273	1,8	0,12470	1,7	0,13862	1,7	0,12128	0,7	0,05366	0,4
0,20	0,00000	0,0	0,01649	1,8	0,03283	1,8	0,06448	1,8	0,12001	1,8	0,16015	1,7	0,18239	1,6	0,18814	1,5	0,11768	0,1	0,05181	0,2
0,25	0,00000	0,0	0,02469	1,8	0,04904	1,8	0,09540	1,8	0,17110	1,7	0,21552	1,6	0,22836	1,4	0,21791	1,1	0,11106	0,5	0,05109	0,1
0,30	0,00000	0,0	0,03408	1,8	0,06750	1,8	0,12985	1,8	0,22311	1,7	0,26354	1,5	0,25912	1,2	0,23024	0,8	0,10695	0,4	0,05073	0,1
0,35	0,00000	0,0	0,04449	1,8	0,08782	1,8	0,16679	1,7	0,27323	1,6	0,30150	1,4	0,27595	0,9	0,23156	0,3	0,10469	0,3	0,05052	0,1
0,40	0,00000	0,0	0,05574	1,8	0,10964	1,8	0,20531	1,7	0,31939	1,5	0,32893	1,2	0,28248	0,6	0,22783	0,0	0,10337	0,2	0,05039	0,0
0,45	0,00000	0,0	0,06770	1,7	0,13264	1,7	0,24460	1,7	0,36029	1,5	0,34690	1,0	0,28267	0,3	0,22275	0,2	0,10253	0,1	0,05030	0,0
0,50	0,00000	0,0	0,08023	1,7	0,15653	1,7	0,28396	1,7	0,39529	1,4	0,35723	0,8	0,27967	0,0	0,21805	0,3	0,10196	0,1	0,05023	0,0

Tabela 5.7: Valores da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis para $\kappa = 0, 2$ calculados de acordo com a Equação (5.32).

A função $\chi_{\kappa}(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\chi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%
0,05	0,00000	0,0	0,00111	7,5	0,00221	7,5	0,00441	7,7	0,00879	7,6	0,01308	7,5	0,01724	7,6	0,02124	7,5	0,03778	7,3	0,04897	6,2
0,10	0,00000	0,0	0,00423	7,6	0,00846	7,5	0,01684	7,5	0,03305	7,5	0,04806	7,4	0,06138	7,4	0,07264	7,3	0,09510	6,1	0,05964	0,1
0,15	0,00000	0,0	0,00913	7,4	0,01821	7,5	0,03604	7,4	0,06918	7,4	0,09701	7,3	0,11793	7,1	0,13138	6,8	0,11802	3,4	0,05442	1,9
0,20	0,00000	0,0	0,01555	7,4	0,03096	7,4	0,06082	7,4	0,11333	7,3	0,15152	7,0	0,17310	6,6	0,17942	6,0	0,11740	0,1	0,05224	1,0
0,25	0,00000	0,0	0,02329	7,4	0,04627	7,3	0,09005	7,3	0,16179	7,1	0,20446	6,7	0,21787	6,0	0,20967	4,9	0,11225	1,6	0,05134	0,6
0,30	0,00000	0,0	0,03217	7,3	0,06372	7,3	0,12265	7,2	0,21130	6,9	0,25090	6,2	0,24892	5,1	0,22402	3,4	0,10828	1,7	0,05089	0,4
0,35	0,00000	0,0	0,04201	7,2	0,08295	7,2	0,15767	7,1	0,25925	6,7	0,28830	5,7	0,26729	4,0	0,22798	1,9	0,10577	1,3	0,05063	0,3
0,40	0,00000	0,0	0,05266	7,2	0,10362	7,2	0,19425	7,0	0,30372	6,4	0,31618	5,0	0,27609	2,9	0,22663	0,5	0,10419	1,0	0,05047	0,2
0,45	0,00000	0,0	0,06399	7,1	0,12542	7,1	0,23162	6,9	0,34349	6,1	0,33541	4,3	0,27871	1,7	0,22325	0,5	0,10315	0,8	0,05036	0,2
0,50	0,00000	0,0	0,07588	7,1	0,14810	7,0	0,26915	6,8	0,37794	5,7	0,34758	3,4	0,27786	0,7	0,21953	1,0	0,10244	0,6	0,05028	0,1

Tabela 5.8: Valores da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis para $\kappa = 0,3$ calculados de acordo com a Equação (5.32).

A função $\chi_{\kappa}(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\chi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%
0,05	0,00000	0,0	0,00099	17,5	0,00197	17,6	0,00394	17,6	0,00785	17,5	0,01168	17,4	0,01541	17,4	0,01899	17,3	0,03386	16,9	0,04453	14,7
0,10	0,00000	0,0	0,00379	17,2	0,00756	17,4	0,01506	17,3	0,02956	17,3	0,04302	17,1	0,05499	17,0	0,06516	16,8	0,08654	14,6	0,05831	2,1
0,15	0,00000	0,0	0,00817	17,1	0,01629	17,2	0,03225	17,2	0,06197	17,0	0,08703	16,8	0,10606	16,4	0,11857	15,9	0,11090	9,2	0,05521	3,4
0,20	0,00000	0,0	0,01392	17,1	0,02772	17,1	0,05448	17,0	0,10169	16,8	0,13638	16,3	0,15658	15,5	0,16350	14,4	0,11454	2,6	0,05309	2,7
0,25	0,00000	0,0	0,02087	17,0	0,04146	17,0	0,08075	16,9	0,14547	16,5	0,18483	15,6	0,19868	14,2	0,19372	12,1	0,11229	1,6	0,05199	1,9
0,30	0,00000	0,0	0,02885	16,9	0,05715	16,8	0,11011	16,7	0,19048	16,1	0,22806	14,8	0,22943	12,5	0,21051	9,3	0,10953	2,8	0,05136	1,3
0,35	0,00000	0,0	0,03770	16,8	0,07446	16,7	0,14172	16,5	0,23442	15,6	0,26387	13,7	0,24950	10,4	0,21808	6,1	0,10733	2,8	0,05099	1,0
0,40	0,00000	0,0	0,04730	16,6	0,09310	16,6	0,17483	16,3	0,27560	15,0	0,29173	12,4	0,26125	8,1	0,22034	3,3	0,10571	2,5	0,05074	0,7
0,45	0,00000	0,0	0,05752	16,5	0,11279	16,4	0,20877	16,1	0,31294	14,4	0,31228	10,9	0,26730	5,7	0,21996	1,0	0,10452	2,1	0,05058	0,6
0,50	0,00000	0,0	0,06826	16,4	0,13332	16,3	0,24297	15,9	0,34588	13,7	0,32672	9,2	0,26977	3,6	0,21843	0,5	0,10363	1,7	0,05046	0,5

Tabela 5.9: Valores da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis para $\kappa = 0,4$ calculados de acordo com a Equação (5.32).

A função $\chi_{\kappa}(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\chi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%
0,05	0,00000	0,0	0,00081	32,5	0,00163	31,8	0,00325	32,0	0,00647	32,0	0,00963	31,9	0,01271	31,8	0,01567	31,8	0,02804	31,2	0,03757	28,0
0,10	0,00000	0,0	0,00312	31,9	0,00624	31,8	0,01242	31,8	0,02441	31,7	0,03555	31,5	0,04550	31,3	0,05401	31,0	0,07308	27,9	0,05373	9,8
0,15	0,00000	0,0	0,00674	31,6	0,01345	31,7	0,02665	31,6	0,05126	31,4	0,07214	31,0	0,08821	30,5	0,09907	29,7	0,09743	20,3	0,05407	1,2
0,20	0,00000	0,0	0,01151	31,5	0,02292	31,5	0,04507	31,4	0,08431	31,0	0,11354	30,3	0,13122	29,2	0,13834	27,5	0,10535	10,4	0,05317	2,8
0,25	0,00000	0,0	0,01727	31,3	0,03432	31,3	0,06689	31,1	0,12096	30,5	0,15476	29,4	0,16827	27,4	0,16677	24,3	0,10706	3,1	0,05243	2,7
0,30	0,00000	0,0	0,02390	31,1	0,04736	31,1	0,09136	30,9	0,15893	30,0	0,19236	28,1	0,19694	24,9	0,18503	20,2	0,10688	0,4	0,05191	2,4
0,35	0,00000	0,0	0,03126	31,0	0,06178	30,9	0,11779	30,6	0,19637	29,3	0,22453	26,5	0,21755	21,9	0,19591	15,7	0,10622	1,8	0,05153	2,1
0,40	0,00000	0,0	0,03927	30,8	0,07733	30,7	0,14557	30,3	0,23194	28,5	0,25079	24,7	0,23166	18,5	0,20207	11,3	0,10550	2,3	0,05126	1,8
0,45	0,00000	0,0	0,04781	30,6	0,09381	30,5	0,17417	30,0	0,26476	27,6	0,27150	22,5	0,24102	15,0	0,20541	7,6	0,10483	2,4	0,05105	1,5
0,50	0,00000	0,0	0,05680	30,4	0,11103	30,3	0,20312	29,7	0,29434	26,6	0,28745	20,1	0,24710	11,7	0,20711	4,7	0,10425	2,4	0,05089	1,3

Tabela 5.10: Valores da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis para $\kappa = 0,5$ calculados de acordo com a Equação (5.32).

A função $\chi_{\kappa}(x, \xi)$ e seu desvio percentual de $\chi(x, \xi)$.																				
	$x = 0$		$x = 0,5$		$x = 1$		$x = 2$		$x = 4$		$x = 6$		$x = 8$		$x = 10$		$x = 20$		$x = 40$	
ξ	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%	$\chi_{\kappa}(x, \xi)$	%
0,05	0,00000	0,0	0,00058	51,7	0,00115	51,9	0,00230	51,9	0,00458	51,8	0,00682	51,8	0,00900	51,7	0,01110	51,7	0,01995	51,1	0,02733	47,7
0,10	0,00000	0,0	0,00221	51,7	0,00442	51,7	0,00880	51,7	0,01730	51,6	0,02522	51,4	0,03234	51,2	0,03847	50,9	0,05322	47,5	0,04301	27,8
0,15	0,00000	0,0	0,00478	51,5	0,00954	51,5	0,01890	51,5	0,03642	51,2	0,05139	50,9	0,06309	50,3	0,07126	49,4	0,07413	39,3	0,04678	12,4
0,20	0,00000	0,0	0,00817	51,4	0,01628	51,3	0,03203	51,2	0,06008	50,8	0,08132	50,1	0,09472	48,9	0,10098	47,1	0,08424	28,3	0,04809	7,0
0,25	0,00000	0,0	0,01228	51,2	0,02441	51,1	0,04762	51,0	0,08650	50,3	0,11160	49,1	0,12297	46,9	0,12414	43,7	0,08932	19,2	0,04870	4,6
0,30	0,00000	0,0	0,01701	51,0	0,03373	50,9	0,06517	50,7	0,11412	49,7	0,13992	47,7	0,14614	44,3	0,14092	39,3	0,09216	13,5	0,04904	3,3
0,35	0,00000	0,0	0,02229	50,8	0,04406	50,7	0,08419	50,4	0,14170	49,0	0,16499	46,0	0,16427	41,0	0,15280	34,2	0,09390	10,0	0,04925	2,5
0,40	0,00000	0,0	0,02803	50,6	0,05524	50,5	0,10428	50,1	0,16829	48,1	0,18644	44,0	0,17819	37,3	0,16128	29,2	0,09506	7,9	0,04939	1,9
0,45	0,00000	0,0	0,03417	50,4	0,06712	50,3	0,12507	49,7	0,19330	47,1	0,20441	41,7	0,18885	33,4	0,16746	24,6	0,09586	6,4	0,04949	1,6
0,50	0,00000	0,0	0,04066	50,2	0,07956	50,0	0,14623	49,4	0,21636	46,0	0,21930	39,1	0,19709	29,6	0,17207	20,8	0,09646	5,3	0,04956	1,3

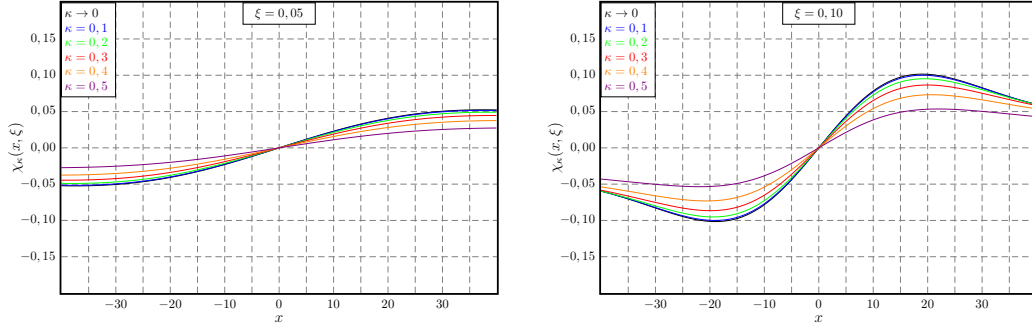


Figura 5.6: Comportamento da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,05$ (à esquerda) e $\xi = 0,10$ (à direita).

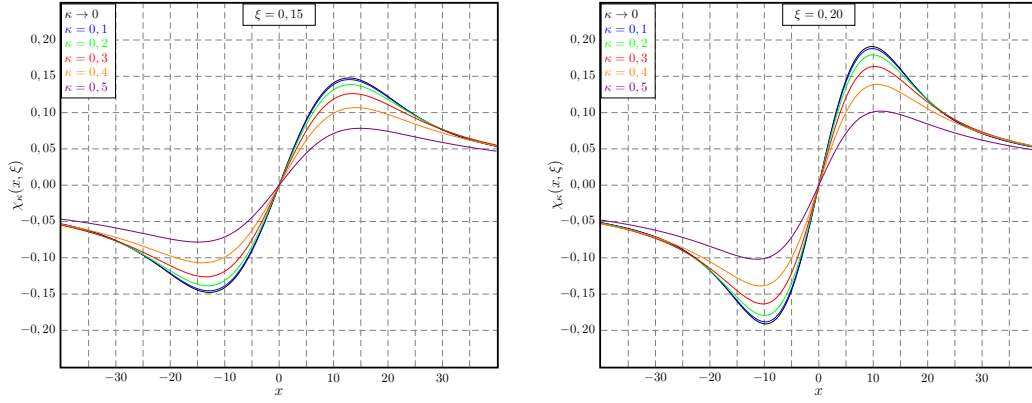


Figura 5.7: Comportamento da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,15$ (à esquerda) e $\xi = 0,20$ (à direita).

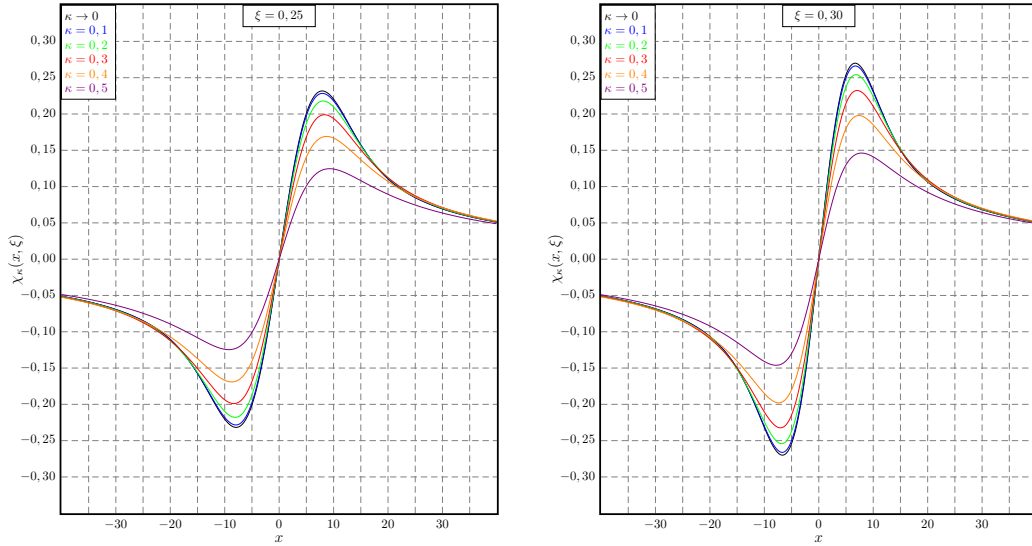


Figura 5.8: Comportamento da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,25$ (à esquerda) e $\xi = 0,30$ (à direita).

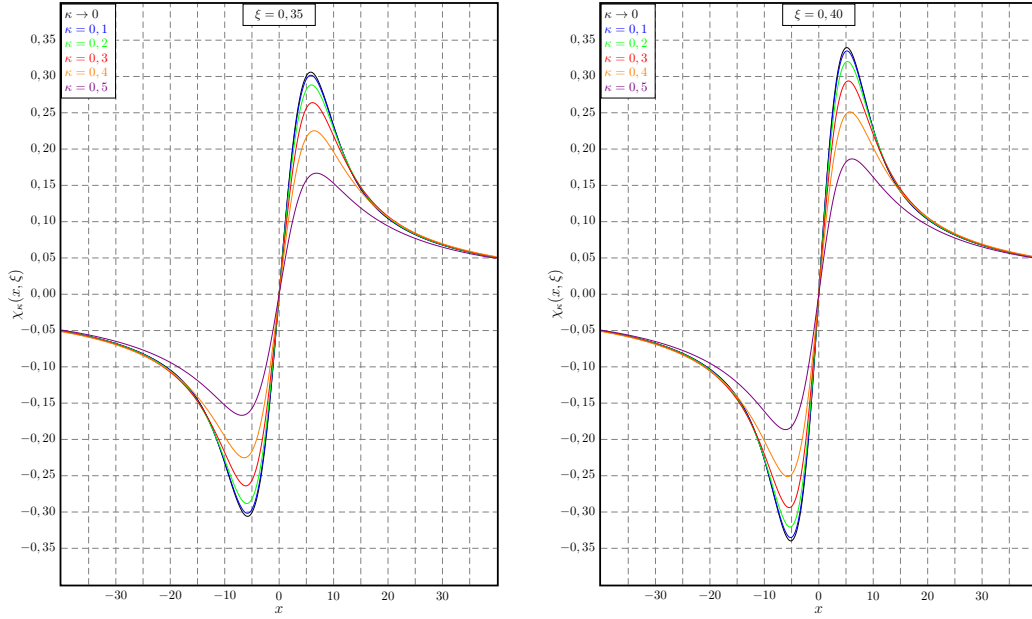


Figura 5.9: Comportamento da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,35$ (à esquerda) e $\xi = 0,40$ (à direita).

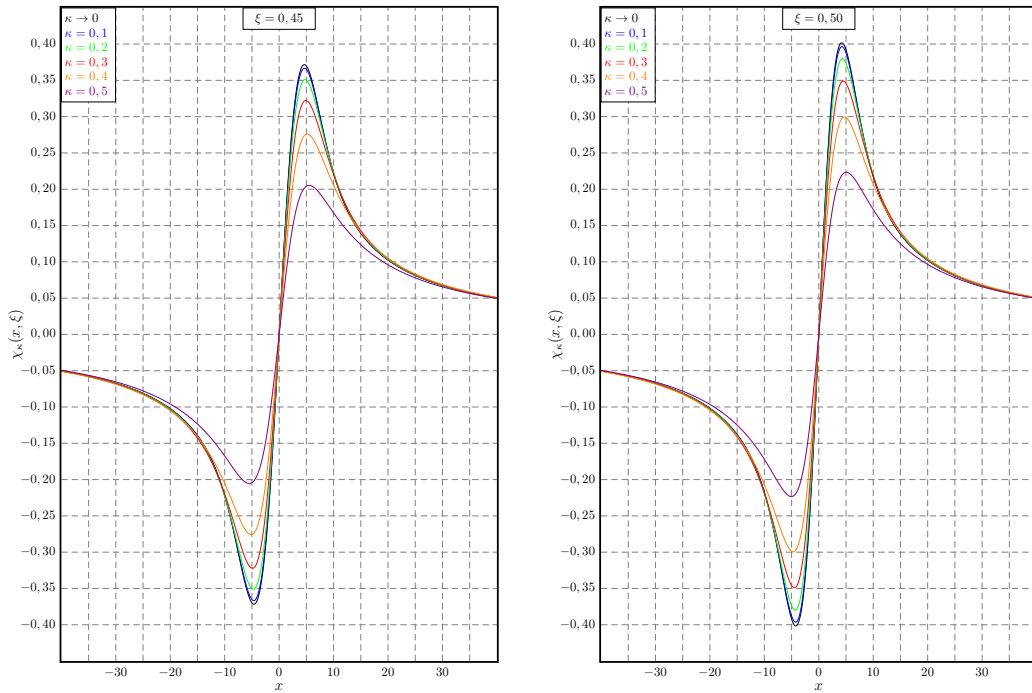


Figura 5.10: Comportamento da Função do Termo de Interferência de Kaniadakis variando κ para $\xi = 0,45$ (à esquerda) e $\xi = 0,50$ (à direita).

Este capítulo avalia a hipótese teórica de se considerar o movimento aleatório dos núcleos alvo como dado pela estatística de Kaniadakis no contexto da Física de Reatores e, mais especificamente, no Efeito de Alargamento Doppler de ressonâncias na região de ressonâncias resolvidas. Assim, novas Funções de Voigt, batizadas como Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis, representada como $\psi_\kappa(x, \xi)$, e

Função do Termo de Interferência de Kaniadakis $\chi_\kappa(x, \xi)$ definidas, respectivamente, pelas Equações (5.31) e (5.32), foram obtidas. Estas funções dependem de um parâmetro de deformação κ , e quando o limite de $\kappa \rightarrow 0$ é obtido, as Funções de Voigt usuais, dadas pelas Equações (2.47) e (2.48), são recuperadas. Estas novas expressões, que apresentam em sua forma integrais que, como no caso maxwelliano, não possuem soluções analíticas, foram avaliadas utilizando o método da quadratura de Gauss-Legendre com 15 pontos.

Percebe-se que, para uma dada ressonância, se o parâmetro ξ é mantido constante, o Fenômeno de Alargamento Doppler é intensificado conforme κ aumenta, ou seja, o parâmetro de deformação κ introduz um alargamento adicional, gerando assim, uma faixa mais larga de energias na qual é mais provável que um nêutron seja capturado.

Conclusão



Entrada do bloco G, no Centro de Tecnologia da UFRJ, onde se localizam as dependências da COPPE.

O Fenômeno de Alargamento Doppler é descrito matematicamente pelas Funções de Voigt, também conhecidas como Função de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e Função do Termo de Interferência $\chi(x, \xi)$. As expressões para $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$ são obtidas baseadas em duas grandes áreas do conhecimento: na Mecânica Quântica, através da fórmula de Breit-Wigner para nível único, e na Mecânica Estatística, com a distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann. Como são obtidas expressões integrais que além de não possuírem solução numérica são complicadas, a possibilidade de se fazer algumas aproximações pode se tornar deveras útil e, neste contexto, são utilizadas as chamadas aproximações de Bethe e Placzek. Nesta tese, são propostas dois tipos diferentes de generalizações para esta teoria: a primeira consiste no estudo das consequências de não se considerar as aproximações de Bethe e Placzek para se obter as Funções de Voigt. A segunda generalização consiste na alteração da distribuição estatística de velocidades utilizada, trocando-se a usual distribuição de Maxwell-Boltzmann por duas distribuições de velocidades quase-maxwellianas: a de Tsallis e a de Kaniadakis.

No capítulo 1, são apresentadas as três distribuições estatísticas abordadas no texto: A distribuição de Maxwell-Boltzmann e as distribuições quase-maxwellianas de Tsallis e de Kaniadakis. São apresentadas as principais características de tais distribuições, possibilitando a comparação das distribuições quase-maxwellianas de Tsallis e Kaniadakis com a distribuição de Maxwell-Boltzmann, formando uma base teórica para se entender os efeitos de se considerar tais distribuições no estudo da seção de choque de captura e de espalhamento ressonantes.

No capítulo 2 é realizada uma dedução detalhada das expressões para as Funções de Voigt definidas por $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$. O detalhamento na condução desta dedução pode parecer um tanto excessivo para o leitor já versado em Física de Reatores. Porém, é de suma importância pois, nos capítulos seguintes, onde se consideram distribuições quase-maxwellianas, se faz necessário dominar com detalhes cada passo de tal demonstração. Além disso, pode-se destacar o valor didático deste capítulo para futuros pesquisadores que estejam a ingressar na área da Física de Reatores.

No capítulo 3 é realizado um estudo das consequências de se desconsiderar as aproximações de Bethe e Placzek na determinação da Função de Alargamento Doppler. Toma-se como referência, neste capítulo, a Função de Alargamento Doppler usual, considerando as três aproximações de Behte e Placzek, definida por $\psi(x, \xi)$. É deduzida, então, uma expressão para a Função de Alargamento Doppler sem nenhuma aproximação $\Psi(x, \xi)$, assim como outras Funções de Alargamento Doppler $\psi_1(x, \xi)$, $\psi_2(x, \xi)$, $\psi_{12}(x, \xi)$ e $\psi_{23}(x, \xi)$ desprezando, quando faz sentido, uma ou duas das aproximações de Bethe e Placzek. Como em todas as novas expressões obtidas aparecem os parâmetros nucleares E_0 e Γ , escolhe-se a ressonância de $6,67\text{eV}$ do ^{238}U e a de $0,296\text{eV}$ do ^{239}Pu para se prosseguir no estudo. A pri-

meira das aproximações é estudada considerando-se a razão entre as exponenciais presentes na Equação (3.18), e os resultados estão reportados na Tabela 3.2, onde pode-se notar que tal aproximação não introduz um erro apreciável. Para estudar a segunda aproximação, compara-se o módulo do limite inferior de integração $|L_{\text{inf}}| = 2E_0/\Gamma$ com o desvio padrão $\sigma_\xi = \sqrt{2}/\xi$ da gaussiana, presente na Equação (3.19), em convolução com a lorentziana. Os resultados obtidos encontram-se na Tabela 3.3, e mostram que a segunda aproximação de Behte e Placzek, assim como a primeira, não introduz um erro significativo para o cálculo do valor de $\psi_{12}(x, \xi)$. Com este panorama, conclui-se que a única aproximação que introduz alguma diferença apreciável é a terceira e, com o intuito de se fazer um estudo quantitativo, considera-se o caso em que o nêutron incidente possui exatamente a energia de ressonância, $x = 0$. Assim, constroem-se os gráficos presentes nas Figuras 3.2 e 3.3, os quais mostram um erro introduzido para a ressonância do ^{238}U em média duas ordens de grandeza maior que para o ^{239}Pu . Além disso, percebe-se que conforme a temperatura aumenta, melhor ficam os valores considerando-se as aproximações de Bethe e Placzek. Para finalizar este capítulo, são apresentadas as interpretações físicas para cada uma das aproximações de Bethe e Placzek, e finalmente é realizada uma proposta alternativa para aplicação de tais aproximações.

No capítulo 4 são abordadas as consequências de se considerar o movimento aleatório dos núcleos alvo como dado pela distribuição não extensiva de Tsallis na avaliação da seção de choque de absorção e de espalhamento em três dimensões. A distribuição de Tsallis pode ser matematicamente formulada como uma deformação da distribuição usual de Maxwell-Boltzmann, e é dependente de um parâmetro $q > 1$ e, se o limite de $q \rightarrow 1$ for tomado, a deformação é removida e se obtém como resultado a distribuição de Maxwell-Boltzmann. Neste contexto, uma nova Função de Alargamento Doppler deformada chamada $\psi_q(x, \xi)$, assim como uma nova Função do Termo de Interferência chamada $\chi_q(x, \xi)$ são obtidas, e dadas pelas Equações (4.19) e (4.20). Tais funções são dependentes de um parâmetro de deformação q , e quando o limite $q \rightarrow 1$ é tomado, se obtém como resultado as Funções de Voigt usuais.

Estas novas expressões, assim como no caso maxwelliano, apresentam em suas leis de formação integrais que não possuem solução analítica. Sendo assim, estas foram avaliadas utilizando o método da quadratura de Gauss-Legendre, método numérico amplamente utilizado e bem estabelecido na literatura. Com o referido método numérico, foram construídas as Tabelas 4.1 a 4.5, onde são apresentados os valores para a Função de Alargamento Doppler de Tsallis e seu desvio percentual em relação à Função de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ usual, assim como as Tabelas 4.6 a 4.10, onde os resultados análogos para a Função do Termo de Interferência de Tsallis são reportados. Estas tabelas foram produzidas variando o parâmetro q com

um incremento de 0,1 desde o valor não deformado $q = 1,0$ até $q = 1,5$.

Ainda usando o método de quadratura de Gauss-Legendre, os gráficos mostrados nas Figuras 4.1 a 4.5 foram gerados onde, para cada um deles, fazendo constante o parâmetro ξ dependente da temperatura, é possível visualizar o comportamento da Função de Alargamento Doppler de Tsallis $\psi_q(x, \xi)$ conforme se varia o parâmetro de deformação q . Os gráficos presentes nas Figuras 4.6 a 4.10 mostram os resultados para a Função do Termo de Interferência deformada $\chi_q(x, \xi)$. Analisando estes gráficos, é possível notar que, para uma dada ressonância, se o parâmetro ξ é mantido constante, o Efeito de Alargamento Doppler é deformado e dependente do parâmetro q , e também é possível perceber que, à medida que q aumenta, o Efeito de Alargamento Doppler é suavizado, ou seja, conforme o parâmetro de deformação q aumenta, o efeito se torna mais suave.

No capítulo 5, é avaliada a hipótese teórica de considerar uma estatística governada pela distribuição de velocidades de Kaniadakis no contexto da física de reatores e, mais especificamente, no Fenômeno de Alargamento Doppler na faixa de ressonâncias resolvidas. Esta distribuição dependente de um parâmetro κ que generaliza o desvio do comportamento exponencial da distribuição de velocidades dos núcleos leva a uma nova Função de Alargamento Doppler chamada $\psi_\kappa(x, \xi)$, assim como uma nova Função do Termo de Interferência $\chi_\kappa(x, \xi)$, definidas pelas equações (5.31) e (5.32), respectivamente. Quando o limite $\kappa \rightarrow 0$ é tomado, as Funções $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$ usuais são recuperadas. Assim como foi feito no capítulo 4, utiliza-se o método de Gauss-Legendre para se construir as tabelas de 5.1 a 5.5 e as Figuras de 5.1 a 5.5, onde são apresentados os resultados para a Função de Alargamento Doppler de Kaniadakis $\psi_\kappa(x, \xi)$, assim como os resultados para a Função do Termo de Interferência de Kaniadakis $\chi_\kappa(x, \xi)$, apresentados nas Tabelas 5.6 a 5.10 e nos Gráficos 5.6 a 5.10.

Pode-se perceber que, para uma dada ressonância, se o parâmetro ξ é mantido constante, o Efeito de Alargamento Doppler é deformado e dependente do parâmetro κ , e verificou-se que conforme κ aumenta, o Efeito de Alargamento Doppler é intensificado, isto é, o parâmetro de deformação κ introduz um alargamento adicional. Assim, se durante um processo térmico as velocidades dos núcleos alvo forem descritas pela distribuição de velocidades de Kaniadakis, há uma maior faixa de energias na qual é mais provável que ocorra a absorção de nêutrons do que aquela que o efeito convencional de Alargamento Doppler poderia prever. Percebe-se que, tanto no caso de se considerar a distribuição de Tsallis quanto a de Kaniadakis, são afetadas tanto a absorção ressonante quanto o espalhamento ressonante.

Em reatores nucleares, a teoria baseada na distribuição de Maxwell-Boltzmann é bem estabelecida e tem sido aplicada ao longo de décadas, produzindo boa concordância com dados experimentais. No entanto, também é amplamente conhecido

que dados de seção de choque precisos e acurados são de importância fundamental para a operação de reatores nucleares, e é possível que em novos projetos de reatores, bem como em situações específicas para os reatores atualmente em operação, o uso de estatísticas não-maxwellianas se tornem importantes. O conteúdo desta tese forma uma base teórica sólida para estudar qualquer distribuição estatística não-maxwelliana que preserve a paridade na variável V . Assim, se no estudo da influência de distribuições quase-maxwellianas no Fenômeno de Alargamento Doppler a importância de se utilizar uma nova distribuição, mesmo que diferente da de Tsallis ou de Kaniadakis tornar se evidente, é razoável dizer que o arcabouço teórico para o tratamento com quaisquer outras distribuições já está estabelecido [64, 65].

Com a teoria bem desenvolvida, uma continuação natural deste trabalho é o estudo da influência de outras distribuições estatísticas no Fenômeno de Alargamento Doppler. Além disso, tanto a generalização proposta pela não consideração das aproximações de Bethe e Placzek, quanto a baseada na alteração da distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann aqui aplicadas na seção de choque de absorção e de espalhamento, podem ser aplicadas ao estudo de vários outros assuntos, tais como o cálculo dos fatores de auto-proteção ressonantes na faixa epitérmica, cálculo das integrais de ressonância, determinação da largura prática, dentre diversas outras aplicações. Além disso, a semelhança entre as Figuras 1.4 e 1.6, assim como entre as Figuras 1.4 e 1.8 indicam a possibilidade de se obter para as duas distribuições estudadas, temperaturas efetivas T_q^{eff} e T_κ^{eff} capazes de mapear as funções de Alargamento Doppler quase-maxwellianas $\psi_q(x, \xi)$ e $\psi_\kappa(x, \xi)$, e também as Funções do Termo de Interferência $\chi_q(x, \xi)$ e $\chi_\kappa(x, \xi)$ em suas correspondentes versões maxwellianas.

Referências Bibliográficas

- [1] BREIT, G., WIGNER, E. “Capture of Slow Neutrons”, *Physical Review (Series I)*, v. 49, pp. 519–531, apr 1936. doi: 10.1103/PhysRev.49.519.
- [2] ADLER, D. B., ADLER, F. T. “Neutron Cross Sections in Fissile Elements”. In: *Proceedings of the conference on breeding, economics and safety in large fast power reactors*, Argonne, IL, USA, oct 1963.
- [3] REICH, C. W., MOORE, M. S. “Multilevel Formula for the Fission Process”, *Physical Review*, v. 111, pp. 929–933, aug 1958. doi: 10.1103/PhysRev.111.929.
- [4] LAMARSH, J. R. *Introduction to NUCLEAR REACTOR THEORY*. 1 ed. New York, USA, Addison-Wesley, 1966.
- [5] BELL, G. I., GLASSTONE, S. *Nuclear Reactor Theory*. 1 ed. New York, USA, Van Nostrand Reinhold Inc., 1970.
- [6] DUDERSTADT, J. J., HAMILTON, L. J. *Nuclear Reactor Analysis*. 1 ed. New York, USA, John Wiley & Sons, 1976.
- [7] STACEY, W. M. *Nuclear Reactor Physics*. 2 ed. Weinheim, Deutschland, John Wiley & Sons, 2007.
- [8] MARGUET, S. *The physics of nuclear reactors*. 2 ed. Palaiseau, France, Springer International Publishing, 2017.
- [9] GONÇALVES, A. C., MARTINEZ, A. S., SILVA, F. C. “Solution of the Doppler broadening function based on the fourier cosine transform”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 35, pp. 1878–1881, oct 2008. doi: 10.1016/j.anucene.2008.04.003.
- [10] MAMEDOV, B. A. “Analytical evaluation of Doppler functions arising from resonance effects in nuclear processes”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, v. 608, pp. 336–338, sep 2009. doi: 10.1016/j.nima.2009.07.008.

- [11] VOIGT, W. “Über Emission und Absorption schichtenweise stetig inhomogener Körper”, *Annalen der Physik*, v. 344, n. 16, pp. 1381–1407, oct 1912. doi: 10.1002/andp.19123441616.
- [12] REICHE, F. “[Sem título]”, *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, v. 15, n. 3, apr 1913.
- [13] DANOS, M., GESCHWIND, S. “Broadening of Microwave Absorption Lines Due to Wall Collisions”, *Physical Review*, v. 91, pp. 1159–1162, sep 1953. doi: 10.1103/PhysRev.91.1159.
- [14] PENNER, S. S., KAVANAGH, R. W. “Radiation from Isolated Spectral Lines with Combined Doppler and Lorentz Broadening”, *Journal of the Optical Society of America*, v. 43, pp. 385–388, may 1953. doi: 10.1364/JOSA.43.000385.
- [15] PENNER, S. S. *Quantitative Molecular Spectroscopy and Gas Emissivities*. 1 ed. Massachussets, USA, Addison-Wesley, 1959.
- [16] POSENER, D. W. “The Shape of Spectral Lines: Tables of the Voigt Profile”, *Australian Journal of Physics*, v. 12, n. 2, pp. 184–196, feb 1959. doi: 10.1071/PH590184.
- [17] FINN, G. D., MUGGLESTONE, D. “Tables of the Line Broadening Function $H(a, \nu)$ ”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 129, n. 2, pp. 221–235, feb 1965. doi: 10.1093/mnras/129.2.221.
- [18] YOUNG, C. “Calculation of the absorption coefficient for lines with combined Doppler and Lorentz broadening”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, v. 5, pp. 549–552, nov 1965. doi: 10.1016/0022-4073(65)90087-7.
- [19] ARMSTRONG, B. H. “SPECTRUM LINE PROFILES: THE VOIGT FUNCTION”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, v. 7, pp. 61–88, jan-feb 1967. doi: 10.1016/0022-4073(67)90057-X.
- [20] JANSSON, P. A., KORB, C. L. “A table of the equivalent widths of isolated lines with combined Doppler and collision broadened profiles”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, v. 8, pp. 1399–1409, jul 1968. doi: 10.1016/0022-4073(68)90115-5.
- [21] WHITING, E. E. “An empirical approximation to the Voigt profile”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, v. 8, pp. 1379–1384, jun 1968. doi: 10.1016/0022-4073(68)90081-2.

- [22] KHUN, W. R., LONDON, J. “Infrared Radiative Cooling in the Middle Atmosphere (30–110 km)”, *Journal of Atmospheric Science*, v. 26, n. 2, pp. 189–204, mar 1969. doi: 10.1175/1520-0469(1969)026<0189:IRCITM>2.0.CO;2.
- [23] MATTA, F., REICHEL, A. “Uniform Computation of the Error Function and Other Related Functions”, *Mathematics of Computation*, v. 25, n. 114, pp. 339–344, apr 1971. doi: 10.1090/S0025-5718-1971-0295538-4.
- [24] KIELKOPF, J. F. “New approximation to the Voigt function with applications to spectral-line profile analysis”, *Journal of the Optical Society of America*, v. 63, pp. 987–995, aug 1973. doi: 10.1364/JOSA.63.000987.
- [25] OLIVERO, J. J., LONGBOTHUM, R. L. “Empirical fits to the Voigt line width: A brief review”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, v. 17, pp. 233–236, feb 1977. doi: 10.1016/0022-4073(77)90161-3.
- [26] BETHE, H. A., PLACZEK, G. “Resonance Effects in Nuclear Processes”, *Physical Review (Series I)*, v. 51, pp. 450–484, mar 1937. doi: 10.1103/PhysRev.51.450.
- [27] MACFARLANE, R. E., MUIR, D. W., BOICOURT, R. M., et al. *The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2012*, 2012.
- [28] BOGHOSIAN, B. M. “Thermodynamic description of the relaxation of two-dimensional turbulence using Tsallis statistics”, *Physical Review E*, v. 53, pp. 4754–4763, may 1996. doi: 10.1103/PhysRevE.53.4754.
- [29] ANTENEODO, C., TSALLIS, C. “Two-dimensional turbulence in pure-electron plasma: A nonextensive thermostistical description”, *Journal of Molecular Liquids*, v. 71, pp. 255–267, apr 1997. doi: 10.1016/S0167-7322(97)00016-0.
- [30] KANIADAKIS, G., LAVAGNO, A., QUARATI, P. “Generalized statistics and solar neutrinos”, *Physics Letters B*, v. 369, pp. 308–312, feb 1996. doi: 10.1016/0370-2693(95)01535-3.
- [31] LAVAGNO, A., KANIADAKIS, G., REGO-MONTEIRO, M., et al. “Non-Extensive Thermostistical Approach of the Peculiar Velocity Function of Galaxy Clusters”, *Astrophysical Letters & Communications*, v. 35, pp. 449–455, feb 1998.

- [32] CHAVANIS, P.-H. “Generalized thermodynamics and Fokker-Planck equations: Applications to stellar dynamics and two-dimensional turbulence”, *Physical Review E*, v. 68, pp. 036108, sep 2003. doi: 10.1103/PhysRevE.68.036108.
- [33] TSALLIS, C. “Possible Generalization of Boltzmann-Gibbs Statistics”, *Journal of Statistical Physics*, v. 52, pp. 479–487, jul 1988. doi: 10.1007/BF01016429.
- [34] KANIADAKIS, G. “Non-linear kinetics underlying generalized statistics”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 296, pp. 405–425, jul 2001. doi: 10.1016/S0378-4371(01)00184-4.
- [35] BEYNON, T. D., GRANT, I. S. “Evaluation of the Doppler-Broadened Single-Level and Interference Functions”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 17, n. 4, pp. 547–550, dec 1963. doi: 10.13182/NSE63-A18446.
- [36] ARFKEN, G., WEBER, H., HARRIS, F. *Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide*. 7 ed. New York, USA, Elsevier, 2013.
- [37] ABRAMOWITZ, M., STEGUN, I. A. *Handbook of Mathematical Functions*. 9 ed. New York, USA, Dover, 1972.
- [38] SOMMERFELD, A. *Lectures on Theoretical Physics, vol. V: Thermodynamics and statistical mechanics*. 1 ed. New York, USA, Academic Press, 1956.
- [39] PATHRIA, R. K., BEALE, P. D. *Statistical Mechanics*. 3 ed. USA, Elsevier, 2011.
- [40] CASQUILHO, J. A. P., TEIXEIRA, I. C. *Introdução à Física Estatística*. 1 ed. São Paulo, Brasil, Livraria da Física, 2012.
- [41] SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*. 12 ed. São Paulo, Brasil, edusp, 2013.
- [42] SILVA JR., R., PLASTINO, A. R., LIMA, J. “A Maxwellian path to the q -nonextensive velocity distribution function”, *Physics Letters A*, v. 249, pp. 401–408, dec 1998. doi: 10.1016/S0375-9601(98)00710-5.
- [43] BOLTZMANN, L. “Über die Beziehung zwischen dem Zweiten Hauptsatze der mechanischen Wärmetheorie und der Wahrscheinlichkeitsrechnung resp. den Sätzen Über das Wärme Gleichgewicht.” *Kais. Akad. Wiss. Wien Math. Naturwiss.*, v. 76, pp. 373–435, 1877.

- [44] SHARP, K., MATSCHINSKY, F. “Translation of Ludwig Boltzmann’s Paper “On the Relationship between the Second Fundamental Theorem of the Mechanical Theory of Heat and Probability Calculations Regarding the Conditions for Thermal Equilibrium” Sitzungberichte der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften. Mathematisch-Naturwissen Classe. Abt. II, LXXVI 1877, pp 373-435 (Wien. Ber. 1877, 76:373-435). Reprinted in Wiss. Abhandlungen, Vol. II, reprint 42, p. 164-223, Barth, Leipzig, 1909”, *Entropy*, v. 17, n. 4, pp. 1971–2009, 2015. doi: 10.3390/e17041971.
- [45] GRADSHTEYN, I. S., RYZHIK, I. M. *Table of Integrals, Series, and Products*. 7 ed. Boston, USA, Academic Press, 2007.
- [46] CURADO, E. M. F., TSALLIS, C. “Generalized statistical mechanics: connection with thermodynamics”, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 24, n. 2, pp. L69–L72, dec 1991. doi: 10.1088/0305-4470/24/2/004.
- [47] TSALLIS, C., MENDES, R. S., R., P. A. “The role of constraints within generalized nonextensive statistics”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 261, pp. 534–554, dec 1998. doi: 10.1016/S0378-4371(98)00437-3.
- [48] LEITHOLD, L. *O Cálculo com Geometria Analítica. vol. 1*. 3 ed. São Paulo, Brasil, HARBRA, 1994.
- [49] STEWART, J. *Calculus*. 7 ed. Belmont, USA, Cengage Learning, 2012.
- [50] SPIEGEL, M. R. *Variáveis Complexas*. 1 ed. São Paulo, Brasil, McGraw-Hill, 2013.
- [51] TSALLIS, C. “Non-extensive thermostatics: brief review and comments”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 221, pp. 277–290, nov 1995. doi: 10.1016/0378-4371(95)00236-Z.
- [52] TSALLIS, C. “Stock exchange: A statistical model”, *Chaos, Solitons & Fractals*, v. 6, pp. 561–567, dec 1995. doi: 10.1016/0960-0779(95)80063-M.
- [53] TSALLIS, C. “Lévy distributions”, *Physics World*, v. 10, n. 7, pp. 42–45, jul 1997. doi: 10.1088/2058-7058/10/7/32.
- [54] PLASTINO, A. R., PLASTINO, A. “Stellar polytropes and Tsallis entropy”, *Physics Letters A*, v. 174, pp. 384–386, mar 1993. doi: 10.1016/0375-9601(93)90195-6.

- [55] SILVA, R., ALCANIZ, J. S. “Non-extensive statistics and the stellar polytrope index”, *Physica A*, v. 52, pp. 479–487, jul 1988. doi: 10.1016/j.physa.2004.02.070.
- [56] LIMA, J. A. S., SOUZA, R. E. “Power law stellar distributions”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 350, pp. 303–314, may 2005. doi: 10.1016/j.physa.2004.10.042.
- [57] SILVA JÚNIOR, R. *Teoria Cinética Não-Extensiva: Efeitos Físicos em Gases e Plasmas*. Tese de doutorado, UFRN, Natal, RN, Brasil, 2000.
- [58] BEZERRA, J. R. *Teoria Cinética Não-Extensiva: Coeficientes de Transporte e Outras Aplicações Físicas*. Tese de doutorado, UFRN, Natal, RN, Brasil, 2005.
- [59] WILK, G., Z. WLODARCZYK, Z. “Fluctuations of cross sections seen in cosmic ray data?” *Physical Review D*, v. 50, n. 3, pp. 2318–2320, aug 1994. doi: 10.1103/PhysRevD.50.2318.
- [60] VILAR, C. S., FRANÇA, G., SILVA, R., et al. “Nonextensivity in Geological Faults?” *Physica A*, v. 377, pp. 285–290, apr 2007. doi: 10.1016/j.physa.2006.11.017.
- [61] KANIADAKIS, G. “Theoretical Foundations and Mathematical Formalism of the Power-Law Tailed Statistical Distributions”, *Entropy*, v. 15, n. 10, pp. 3983–4010, sep 2013. doi: 10.3390/e15103983.
- [62] MURRAY, R. L. “The Reaction Rate of Neutrons in a Maxwellian Medium”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 26, n. 3, pp. 362–365, oct 1966. doi: 10.13182/NSE66-A17357.
- [63] CACUCI, D. G. *Handbook of Nuclear Engineering*. 1 ed. New York, USA, Springer, 2010.
- [64] GUEDES, G., GONÇALVES, A. C., PALMA, D. A. P. “The Doppler Broadening Function using the Kaniadakis distribution”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 110, pp. 453–458, dec 2017. doi: 10.1016/j.anucene.2017.06.057.
- [65] GUEDES, G., PALMA, D. A. P., GONÇALVES, A. C. “A deformed Doppler Broadening Function considering the Tsallis speed distribution”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 128, pp. 414–421, jun 2019. doi: 10.1016/j.anucene.2019.01.023.

- [66] BURDEN, R. L., FAIRES, J. D. *Numerical Analysis*. 9 ed. Boston, USA, Brooks Cole, 2011.
- [67] APOSTOL, T. M. *Calculus, Vol. 2: Multi-Variable Calculus and Linear Algebra with Applications to Differential Equations and Probability*. 1 ed. New York, USA, John Wiley, 1967.
- [68] LIMA, E. L. *Álgebra Linear*. 7 ed. Rio de Janeiro, Brasil, IMPA, 2006.
- [69] ZANGWILL, A. *Modern Electrodynamics*. 1 ed. New York, USA, Cambridge University Press, 2013.

Apêndice A

Estudo do sistema de duas partículas no referencial do centro de massa

Neste apêndice, apresenta-se um estudo do sistema nêutron núcleo alvo, relacionando os valores de algumas grandezas no referencial do laboratório com seus respectivos valores no referencial do centro de massa. Na figura abaixo, temos uma representação pictórica para tal sistema, com o núcleo alvo possuindo massa M e velocidade \vec{V} , e o nêutron massa m_n e velocidade \vec{v} .



Figura A.1: Representação do sistema nêutron núcleo alvo.

Para tal sistema, a velocidade do centro de massa pode ser escrita da seguinte forma:

$$\vec{V}_{CM} = \frac{m_n \vec{v} + M \vec{V}}{M + m_n} = \frac{\vec{v} + A \vec{V}}{A + 1}, \quad (\text{A.1})$$

onde se utilizou o fato de que $M \approx A m_n$.

Assim, a velocidade do nêutron no referencial do centro de massa, que será representada por \vec{v}' , é dada por:

$$\vec{v}' = \vec{v} - \vec{V}_{CM} = \vec{v} - \left(\frac{\vec{v} + A \vec{V}}{A + 1} \right) = \left(\frac{A}{A + 1} \right) (\vec{v} - \vec{V}). \quad (\text{A.2})$$

Definindo a velocidade relativa entre nêutron e núcleo como $\vec{v}_r = \vec{v} - \vec{V}$, pode-se finalmente escrever:

$$\vec{v}' = \left(\frac{A}{A+1} \right) \vec{v}_r. \quad (\text{A.3})$$

De forma análoga, a velocidade do núcleo alvo no referencial do centro de massa fica:

$$\vec{V}' = - \left(\frac{1}{A+1} \right) \vec{v}_r. \quad (\text{A.4})$$

Pode-se escrever a energia do nêutron no referencial do centro de massa como segue:

$$E' = \frac{1}{2} m_n v'^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{A}{A+1} \right)^2 m_n v_r^2, \quad (\text{A.5})$$

e a do núcleo alvo:

$$E'_A = \frac{1}{2} M V'^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{A}{(A+1)^2} \right] m_n v_r^2. \quad (\text{A.6})$$

A energia total do sistema no referencial do centro de massa é dada pela seguinte expressão:

$$E_{\text{CM}} = E' + E'_A = \frac{1}{2} \left(\frac{A}{A+1} \right) m_n v_r^2, \quad (\text{A.7})$$

ou, usando o fato de que a massa reduzida é dada por:

$$\mu = \frac{M m_n}{M + m_n} = \left(\frac{A}{A+1} \right) m_n, \quad (\text{A.8})$$

pode-se escrever:

$$E_{\text{CM}} = \frac{1}{2} \mu v_r^2. \quad (\text{A.9})$$

Além disso, é útil se obter uma relação entre a energia do sistema nêutron núcleo no referencial do laboratório, e no referencial do Centro de Massa. Assim, fazendo uso das Equações (2.14) e (A.7), tem-se o seguinte:

$$\frac{E}{E'} = \frac{\frac{1}{2} m_n v^2}{\frac{1}{2} \left(\frac{A}{A+1} \right) m_n v_r^2} = \left(\frac{A+1}{A} \right) \frac{v^2}{v_r^2}. \quad (\text{A.10})$$

Tipicamente, as velocidades dos nêutrons são muito maiores que as dos núcleos alvo ($v \gg V$), o que leva a concluir que $v_r \approx v$. Assim, chega-se finalmente ao seguinte resultado:

$$E = \left(\frac{A+1}{A} \right) E', \quad (\text{A.11})$$

que pode também ser escrito como segue:

$$E = \left(\frac{M + m_n}{M} \right) E'. \quad (\text{A.12})$$

Apêndice B

O método da Quadratura de Gauss-Legendre

Os métodos numéricos ditos de quadratura, consistem na aproximação da integral definida no intervalo $[a, b]$ de uma função contínua definida por $f(x)$ pela combinação linear dos valores da função em certos pontos, também chamados de nós, $x_i \in [a, b]$ a serem determinados. De um modo genérico, uma quadratura de ordem N pode ser expressa pela seguinte equação:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^N \omega_i f(x_i), \quad (\text{B.1})$$

onde ω_i , os coeficientes da citada combinação linear, são chamados de pesos da quadratura. O somatório que aparece no lado direito da Equação (B.1) é chamado de quadratura da função f no intervalo $[a, b]$. Como $1 \leq i \leq N, i \in \mathbb{N}$, percebe-se que existem $2N$ parâmetros a serem ajustados. De acordo com o método escolhido para se determinar estes parâmetros, pode-se agrupar as quadraturas em duas classes:

1. O intervalo $[a, b]$ é dividido em $N + 1$ partes de mesmo tamanho escolhendo-se os pontos x_i igualmente espaçados;
2. Os pontos x_i são escolhidos como sendo raízes de polinômios especiais, e os pesos ω_i são determinados de modo que a expressão satisfaça um critério de precisão pré-estabelecido.

O método do trapézio e de Simpson são exemplos de quadraturas elencadas na primeira categoria e os métodos de Gauss-Hermite e o de Gauss-Legendre são exemplos de quadraturas da segunda. Por ser o método utilizado nesta tese, neste Apêndice é abordado exclusivamente o método de Gauss-Legendre.

Ao se trabalhar com a Equação (B.1), as equações envolvidas ficam mais simples se os limites de integração a e b forem trocados por -1 e 1 . Assim, a Equação (B.1)

assume a seguinte forma:

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{i=1}^N \omega_i f(x_i), \quad (\text{B.2})$$

onde $x_i \in [-1, 1]$. Uma aproximação para uma integral no intervalo $[a, b]$ pode ser obtida com uma mudança de variáveis, conforme será mostrado na seção B.6.

Os pesos ω_i na Equação (B.2) são arbitrários e a única restrição para os nós é que $x_i \in [-1, 1]$, $\forall x_i$, o que nos fornece $2N$ parâmetros a determinar. Se considerar-se como parâmetros os coeficientes de um polinômio, um polinômio de grau $2N - 1$ também contém $2N$ parâmetros. Sendo assim, se espera que a expressão dada pela Equação (B.2) se torne exata para qualquer polinômio de grau menor ou igual a $2N - 1$.

B.1 Quadratura de Gauss com 1 ponto

O caso mais simples possível é o da quadratura com 1 ponto, o que consiste em fazer $N = 1$ na Equação (B.2):

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \omega_1 f(x_1). \quad (\text{B.3})$$

Neste caso, a aproximação definida na Equação (B.3) se torna exata quando $f(x)$ é um polinômio de grau 1:

$$f(x) = c_0 + c_1 x. \quad (\text{B.4})$$

Levando em conta a Equação (B.4), percebe-se que a aproximação definida na Equação (B.3) será exata em particular para as funções definidas por $f_A(x) = 1$ e $f_B(x) = x$. Assim, temos:

$$f_A(x) = 1 \Rightarrow \int_{-1}^1 f_A(x)dx = \omega_1 f_A(x_1) \Rightarrow \int_{-1}^1 dx = \omega_1 \Rightarrow \omega_1 = 2, \quad (\text{B.5})$$

$$f_B(x) = x \Rightarrow \int_{-1}^1 f_B(x)dx = \omega_1 f_B(x_1) \Rightarrow \int_{-1}^1 x dx = \omega_1 x_1 \Rightarrow \omega_1 x_1 = 0. \quad (\text{B.6})$$

As Equações (B.5) e (B.6) nos levam ao seguinte sistema:

$$\begin{cases} \omega_1 = 2 \\ \omega_1 c_1 x_1 = 0 \end{cases}, \quad (\text{B.7})$$

cuja solução é a seguinte:

$$\begin{cases} \omega_1 = 2 \\ x_1 = 0 \end{cases}. \quad (\text{B.8})$$

Substituindo o resultado da Equação (B.8) na Equação (B.3), chega-se ao seguinte resultado:

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx 2f(0), \quad (\text{B.9})$$

que é válido para uma função f qualquer, porém se torna exata se esta for um polinômio de grau 1.

B.2 Quadratura de Gauss com 2 pontos

Na quadratura com 2 pontos, se faz $N = 2$ na Equação (B.2):

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \omega_1 f(x_1) + \omega_2 f(x_2). \quad (\text{B.10})$$

Neste caso, a aproximação definida na Equação (B.10) se torna exata quando $f(x)$ é um polinômio de grau 3:

$$f(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3. \quad (\text{B.11})$$

Desta vez, usa-se as funções definidas por $f_A(x) = 1$, $f_B(x) = x$, $f_C(x) = x^2$ e $f_D(x) = x^3$. Assim, tem-se:

$$\begin{aligned} f_A(x) = 1 &\Rightarrow \int_{-1}^1 f_A(x)dx = \omega_1 f_A(x_1) + \omega_2 f_A(x_2) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \int_{-1}^1 dx = \omega_1 + \omega_2 \Rightarrow \omega_1 + \omega_2 = 2, \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

$$\begin{aligned} f_B(x) = x &\Rightarrow \int_{-1}^1 f_B(x)dx = \omega_1 f_B(x_1) + \omega_2 f_B(x_2) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \int_{-1}^1 xdx = \omega_1 x_1 + \omega_2 x_2 \Rightarrow \omega_1 x_1 + \omega_2 x_2 = 0, \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

$$\begin{aligned} f_C(x) = x^2 &\Rightarrow \int_{-1}^1 f_C(x)dx = \omega_1 f_C(x_1) + \omega_2 f_C(x_2) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \int_{-1}^1 x^2 dx = \omega_1 x_1^2 + \omega_2 x_2^2 \Rightarrow \omega_1 x_1^2 + \omega_2 x_2^2 = \frac{2}{3}, \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

$$\begin{aligned}
f_D(x) = x^3 &\Rightarrow \int_{-1}^1 f_B(x) dx = \omega_1 f_B(x_1) + \omega_2 f_B(x_2) \Rightarrow \\
&\Rightarrow \int_{-1}^1 x^3 dx = \omega_1 x_1^3 + \omega_2 x_2^3 \Rightarrow \omega_1 x_1^3 + \omega_2 x_2^3 = 0.
\end{aligned} \tag{B.15}$$

As Equações (B.12), (B.13), (B.14) e (B.15) nos levam ao seguinte sistema:

$$\begin{cases} \omega_1 + \omega_2 = 2 \\ \omega_1 x_1 + \omega_2 x_2 = 0 \\ \omega_1 x_1^2 + \omega_2 x_2^2 = 2/3 \\ \omega_1 x_1^3 + \omega_2 x_2^3 = 0 \end{cases} . \tag{B.16}$$

O primeiro passo para se resolver este sistema é isolar x_2 na primeira linha da Equação (B.16) e substituir na quarta:

$$\omega_1 x_1^3 + \omega_2 \left(-\frac{\omega_1 x_1}{\omega_2} \right)^3 = 0 \Rightarrow \omega_1 \left[1 - \left(\frac{\omega_1}{\omega_2} \right)^2 \right] x_1^3 = 0, \tag{B.17}$$

que admite as seguintes possibilidades de solução: $\omega_1 = 0$, $x_1 = 0$ ou $1 - \left(\frac{\omega_1}{\omega_2} \right)^2 = 0$. As duas primeiras possibilidades dão origem aos seguintes sistemas:

$$\omega_1 = 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_2 = 2 \\ \omega_2 x_2 = 0 \\ \omega_2 x_2^2 = 2/3 \\ \omega_2 x_2^3 = 0 \end{cases}, \quad x_1 = 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 + \omega_2 = 2 \\ \omega_2 x_2 = 0 \\ \omega_2 x_2^2 = 2/3 \\ \omega_2 x_2^3 = 0 \end{cases}. \tag{B.18}$$

Como se pode perceber, os dois sistemas não possuem solução. Assim, resta apenas a última possibilidade:

$$1 - \left(\frac{\omega_1}{\omega_2} \right)^2 = 0 \Rightarrow \omega_1 = \pm \omega_2. \tag{B.19}$$

A solução com sinal negativo deve ser descartada, pois leva a $\omega_1 + \omega_2 = 0$, gerando uma inconsistência com a primeira linha da Equação (B.16). Por outro lado, com $\omega_1 = \omega_2$, tem-se o seguinte:

$$\omega_1 = \omega_2 = 1, \tag{B.20}$$

o que reduz o sistema apresentado na Equação (B.16) a:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 0 \\ x_1^2 + x_2^2 = 2/3 \\ x_1^3 + x_2^3 = 0 \end{cases}, \tag{B.21}$$

o que leva facilmente à seguinte solução:

$$\begin{cases} \omega_1 = 1 \\ \omega_2 = 1 \\ x_1 = -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ x_2 = \frac{\sqrt{3}}{3} \end{cases}, \quad (\text{B.22})$$

Substituindo a Equação (B.22) na Equação (B.10), chega-se ao resultado abaixo:

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right). \quad (\text{B.23})$$

B.3 Quadratura de Gauss com 3 pontos

Na quadratura com 3 pontos, se faz $N = 3$ na Equação (B.2):

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \omega_1 f(x_1) + \omega_2 f(x_2) + \omega_3 f(x_3). \quad (\text{B.24})$$

De modo análogo às seções anteriores, chega-se ao seguinte sistema:

$$\begin{cases} \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 = 2 \\ \omega_1 x_1 + \omega_2 x_2 + \omega_3 x_3 = 0 \\ \omega_1 x_1^2 + \omega_2 x_2^2 + \omega_3 x_3^2 = 2/3 \\ \omega_1 x_1^3 + \omega_2 x_2^3 + \omega_3 x_3^3 = 0 \\ \omega_1 x_1^4 + \omega_2 x_2^4 + \omega_3 x_3^4 = 2/5 \\ \omega_1 x_1^5 + \omega_2 x_2^5 + \omega_3 x_3^5 = 0 \end{cases}. \quad (\text{B.25})$$

A solução do sistema definido na Equação (B.25) é ainda mais tedioso, por esse motivo, apenas a solução do mesmo será apresentada:

$$\begin{cases} \omega_1 = 5/9 \\ \omega_2 = 8/9 \\ \omega_3 = 5/9 \\ x_1 = -\frac{\sqrt{15}}{5} \\ x_2 = 0 \\ x_3 = \frac{\sqrt{15}}{5} \end{cases}, \quad (\text{B.26})$$

levando à seguinte aproximação:

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \frac{5}{9}f\left(-\frac{\sqrt{15}}{5}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\frac{\sqrt{15}}{5}\right). \quad (\text{B.27})$$

Como se pode perceber, para 3 pontos, o cálculo já se torna bem extenso e tedioso, e o objetivo é se chegar em 15 pontos, que é o método utilizado nesta tese. Sendo assim, se torna necessário encontrar um meio mais direto de se determinar os pesos e nós da quadratura.

B.4 Os Polinômios de Legendre

Nas seções anteriores, percebe-se que os sistemas obtidos para se determinar os pesos e nós a serem utilizados podem se mostrar bem complexos de se resolver. Se invocarmos a Álgebra Linear [68], pode-se entender que tal dificuldade ocorre devido ao fato de se ter utilizado a base canônica $\mathcal{B} = \{1, x, x^2, x^3, \dots, x^{n-1}, x^n\}$ para o espaço vetorial dos polinômios de grau menor ou igual a n , e esta não ser a melhor das escolhas. Uma alternativa mais interessante, devido à algumas propriedades, se trata da base formada pelos chamados *polinômios de Legendre* [36]. Trata-se de uma base ortogonal que possui propriedades interessantes, que são úteis para se encontrar os pesos e nós da quadratura.

Os polinômios de Legendre formam um conjunto Linearmente Independente (LI) para as soluções da *equação diferencial de Legendre*, que possui a seguinte forma:

$$\frac{d}{dx} \left[(1 - x^2) \frac{d}{dx} L_n(x) \right] + n(n+1) L_n(x) = 0. \quad (\text{B.28})$$

Tal equação diferencial é frequentemente encontrada na Física, em particular ao se resolver a equação de Laplace em coordenadas esféricas [69], podendo também ser trabalhada como um problema de Sturm-Liouville [36]. O produto interno entre dois polinômios de Legendre é definido como:

$$\langle P_m(x), P_n(x) \rangle = \int_{-1}^1 L_m(x) L_n(x) dx, \quad (\text{B.29})$$

o qual define a seguinte expressão de ortogonalidade:

$$\int_{-1}^1 L_n(x) L_m(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm}. \quad (\text{B.30})$$

Os polinômios de Legendre podem ser obtidos através da *Fórmula de Rodrigues*:

$$L_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n], \quad (\text{B.31})$$

sendo os primeiros polinômios de Legendre os seguintes:

$$\begin{aligned}
L_0(x) &= 1, \\
L_1(x) &= x, \\
L_2(x) &= \frac{1}{2} (3x^2 - 1), \\
L_3(x) &= \frac{1}{2} (5x^3 - 3x), \\
L_4(x) &= \frac{1}{8} (35x^4 - 30x^2 + 3), \\
L_5(x) &= \frac{1}{8} (63x^5 - 70x^3 + 15x), \\
L_6(x) &= \frac{1}{16} (231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5).
\end{aligned}$$

Dentre tantas propriedades exibidas pelos polinômios de Legendre, as seguintes são fundamentais para se descrever o método da quadratura de Gauss-Legendre:

$$\int_{-1}^1 L_n(x) dx = 0 \quad n \neq 0, \quad (\text{B.32})$$

$$\int_{-1}^1 L_n(x) P_k(x) dx = 0 \quad \forall k < n, \quad (\text{B.33})$$

onde $P_k(x)$ é um polinômio de grau k .

B.5 Quadratura de Gauss-Legendre

Como se sabe, uma quadratura com N pontos é capaz de ajustar um polinômio de grau $2N - 1$ de forma exata. Em particular, é válida para um polinômio de Legendre de grau N , $L_N(x)$:

$$\int_{-1}^1 L_N(x) dx = \sum_{i=1}^N \omega_i L_N(x_i). \quad (\text{B.34})$$

Lançando mão da Equação (B.32), se tem o seguinte:

$$\sum_{i=1}^N \omega_i L_N(x_i) = 0. \quad (\text{B.35})$$

Como o conjunto formado pelos polinômios de Legendre é linearmente independente, a única forma da igualdade apresentada na equação (B.35) ser satisfeita é:

$$L_N(x_i) = 0 \quad i = 0, 1, 2, \dots, N - 1, N, \quad (\text{B.36})$$

ou seja, os nós da quadratura com N pontos são as raízes do polinômio de Legendre $L_N(x)$. Para determinar os pesos, pode-se utilizar o seguinte teorema [66]:

Teorema B.1 *Suponha que $x_1, x_2, x_3, \dots, x_N$ sejam as raízes do polinômio de Legendre de grau N $L_N(x)$ e que para cada $i = 1, 2, 3, \dots, N$ os números ω_i sejam definidos por:*

$$\omega_i = \int_{-1}^1 \prod_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx. \quad (\text{B.37})$$

Se $P_N(x)$ é um polinômio qualquer de grau N , então:

$$\int_{-1}^1 P_N(x) dx = \sum_{i=1}^N \omega_i P_N(x_i). \quad (\text{B.38})$$

Este teorema é facilmente demonstrado utilizando-se a propriedade descrita pela Equação (B.33), e tal demonstração pode ser encontrada em [66]. As raízes dos polinômios de Legendre podem ser facilmente determinadas com alta precisão através de métodos numéricos e, com os valores das raízes em mão, pode-se determinar os pesos através do Teorema B.1. Porém, estes valores já estão exaustivamente tabelados, e podem ser encontrados com certa facilidade. Na Tabela B.1 são reportados os valores utilizados nesta tese.

Tabela B.1: Pontos de Legendre x_i e seus respectivos pesos ω_i .

i	x_i	ω_i
1	0,987992518020485	0,030753241996117
2	0,937273392400706	0,070366047488108
3	0,848206583410427	0,107159220467172
4	0,724417731360170	0,139570677926154
5	0,570972172608539	0,166269205816994
6	0,394151347077563	0,186161000015562
7	0,201194093997435	0,198431485327111
8	0,000000000000000	0,202578241925561
9	-0,201194093997435	0,198431485327111
10	-0,394151347077563	0,186161000015562
11	-0,570972172608539	0,166269205816994
12	-0,724417731360170	0,139570677926154
13	-0,848206583410427	0,107159220467172
14	-0,937273392400706	0,070366047488108
15	-0,987992518020485	0,030753241996117

B.6 Mudança de variáveis

Foi discutido como se fazer uma aproximação numérica para a integral de uma função definida por $f(x)$ no intervalo $[-1, 1]$. Para se encontrar uma expressão aplicável em um caso mais geral, basta se determinar uma mudança de variáveis que transforme a integral no intervalo $[-1, 1]$ em uma integral com limites $[a, b]$. Para tal, supõe-se uma mudança de variáveis linear em x :

$$x = At + B. \quad (\text{B.39})$$

Considerando que:

- $x = a \Rightarrow t = -1$,
- $x = b \Rightarrow t = 1$,

é fácil mostrar que a substituição procurada é do tipo:

$$x = \frac{(b-a)}{2}t + \frac{(b+a)}{2}, \quad (\text{B.40})$$

o que permite escrever:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right) dt. \quad (\text{B.41})$$

Assim, fazendo uso da Equação (B.1), chega-se na seguinte expressão:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^N \omega_i f\left(\frac{b-a}{2}x_i + \frac{b+a}{2}\right). \quad (\text{B.42})$$